

O. Schöller.

Frankfurt a. M. 1902.

Anwendung der Generatorkoordinatenmethode
auf quantenmechanische Streuprobleme

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

von

Otmar Schöllner
aus Winden, Kreis Düren

Frankfurt am Main

1982



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereiches Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

Dekan:	Prof. Dr. R. Dreizler
Leiter der Arbeit:	Prof. Dr. R. Dreizler
Erstgutachter:	Prof. Dr. R. Dreizler
Zweitgutachter:	Prof. Dr. J. Maruhn

Tag der mündlichen Prüfung: 14.06.1982

Diese Arbeit wurde von Juni 1981 bis Juni 1982
von der FAZIT-Stiftung, Frankfurt gefördert

1.	Die Gesamtstruktur der Arbeit und ihre	7
1.1	Einleitung	7
1.2	Der Gesamtstrukturplan der Arbeit	7
1.3	Die Gliederung der Arbeit	7
2.	Die Gliederung der Arbeit	7
2.1	Die Gliederung der Arbeit	7
2.2	Die Gliederung der Arbeit	7
2.3	Die Gliederung der Arbeit	7
2.4	Die Gliederung der Arbeit	7
2.5	Die Gliederung der Arbeit	7
2.6	Die Gliederung der Arbeit	7
2.7	Die Gliederung der Arbeit	7
2.8	Die Gliederung der Arbeit	7
2.9	Die Gliederung der Arbeit	7
2.10	Die Gliederung der Arbeit	7
2.11	Die Gliederung der Arbeit	7
2.12	Die Gliederung der Arbeit	7
2.13	Die Gliederung der Arbeit	7
2.14	Die Gliederung der Arbeit	7
2.15	Die Gliederung der Arbeit	7
2.16	Die Gliederung der Arbeit	7
2.17	Die Gliederung der Arbeit	7
2.18	Die Gliederung der Arbeit	7
2.19	Die Gliederung der Arbeit	7
2.20	Die Gliederung der Arbeit	7
2.21	Die Gliederung der Arbeit	7
2.22	Die Gliederung der Arbeit	7
2.23	Die Gliederung der Arbeit	7
2.24	Die Gliederung der Arbeit	7
2.25	Die Gliederung der Arbeit	7
2.26	Die Gliederung der Arbeit	7
2.27	Die Gliederung der Arbeit	7
2.28	Die Gliederung der Arbeit	7
2.29	Die Gliederung der Arbeit	7
2.30	Die Gliederung der Arbeit	7
2.31	Die Gliederung der Arbeit	7
2.32	Die Gliederung der Arbeit	7
2.33	Die Gliederung der Arbeit	7
2.34	Die Gliederung der Arbeit	7
2.35	Die Gliederung der Arbeit	7
2.36	Die Gliederung der Arbeit	7
2.37	Die Gliederung der Arbeit	7
2.38	Die Gliederung der Arbeit	7
2.39	Die Gliederung der Arbeit	7
2.40	Die Gliederung der Arbeit	7
2.41	Die Gliederung der Arbeit	7
2.42	Die Gliederung der Arbeit	7
2.43	Die Gliederung der Arbeit	7
2.44	Die Gliederung der Arbeit	7
2.45	Die Gliederung der Arbeit	7
2.46	Die Gliederung der Arbeit	7
2.47	Die Gliederung der Arbeit	7
2.48	Die Gliederung der Arbeit	7
2.49	Die Gliederung der Arbeit	7
2.50	Die Gliederung der Arbeit	7
2.51	Die Gliederung der Arbeit	7
2.52	Die Gliederung der Arbeit	7
2.53	Die Gliederung der Arbeit	7
2.54	Die Gliederung der Arbeit	7
2.55	Die Gliederung der Arbeit	7
2.56	Die Gliederung der Arbeit	7
2.57	Die Gliederung der Arbeit	7
2.58	Die Gliederung der Arbeit	7
2.59	Die Gliederung der Arbeit	7
2.60	Die Gliederung der Arbeit	7
2.61	Die Gliederung der Arbeit	7
2.62	Die Gliederung der Arbeit	7
2.63	Die Gliederung der Arbeit	7
2.64	Die Gliederung der Arbeit	7
2.65	Die Gliederung der Arbeit	7
2.66	Die Gliederung der Arbeit	7
2.67	Die Gliederung der Arbeit	7
2.68	Die Gliederung der Arbeit	7
2.69	Die Gliederung der Arbeit	7
2.70	Die Gliederung der Arbeit	7
2.71	Die Gliederung der Arbeit	7
2.72	Die Gliederung der Arbeit	7
2.73	Die Gliederung der Arbeit	7
2.74	Die Gliederung der Arbeit	7
2.75	Die Gliederung der Arbeit	7
2.76	Die Gliederung der Arbeit	7
2.77	Die Gliederung der Arbeit	7
2.78	Die Gliederung der Arbeit	7
2.79	Die Gliederung der Arbeit	7
2.80	Die Gliederung der Arbeit	7
2.81	Die Gliederung der Arbeit	7
2.82	Die Gliederung der Arbeit	7
2.83	Die Gliederung der Arbeit	7
2.84	Die Gliederung der Arbeit	7
2.85	Die Gliederung der Arbeit	7
2.86	Die Gliederung der Arbeit	7
2.87	Die Gliederung der Arbeit	7
2.88	Die Gliederung der Arbeit	7
2.89	Die Gliederung der Arbeit	7
2.90	Die Gliederung der Arbeit	7
2.91	Die Gliederung der Arbeit	7
2.92	Die Gliederung der Arbeit	7
2.93	Die Gliederung der Arbeit	7
2.94	Die Gliederung der Arbeit	7
2.95	Die Gliederung der Arbeit	7
2.96	Die Gliederung der Arbeit	7
2.97	Die Gliederung der Arbeit	7
2.98	Die Gliederung der Arbeit	7
2.99	Die Gliederung der Arbeit	7
3.	Die Gliederung der Arbeit	7

Digitized by the Internet Archive
in 2026

Inhaltsverzeichnis

Seite

1.	Einleitung	1
2.	Die Generatorkoordinatenmethode und ihre bisherigen Anwendungsgebiete	7
2.1	Der Generatorkoordinatenansatz für die Wellenfunktion	9
2.2	Behandlung gebundener Probleme	13
2.2.1	Lösungsmethode der Hill-Wheeler-Gleichung nach Lathouwers	14
2.2.2	Der Generatorkoordinatenraum als Unterraum des Vielteilchen-Hilbertraumes	16
2.3.	Behandlung komplexer Kernreaktionen	18
2.3.1	Herleitung der Hill-Wheeler-Gleichung aus einem Variationsprinzip	26
2.3.2	Die Zeit als Generatorkoordinate	31
3.	Diskussion der stationären Streutheorie im Generatorkoordinatenformalismus	34
3.1	Die Hill-Wheeler-Gleichung für Potentialstreuung	34
3.1.1	Entwicklung nach Partialwellen	36
3.1.2	Untersuchte Modellprobleme	40
3.1.2.1	s-Wellen-Streuung am anziehenden Exponentialpotential	40
3.1.2.2	p-Wellen-Streuung am anziehenden Exponentialpotential	43
3.1.2.3	s-Wellen-Streuung am abstoßenden Exponentialpotential	45
3.1.2.4	s-Wellen-Streuung am Morsepotential	50
3.2	Mathematische Betrachtungen	53
3.2.1	Modifizierter Hill-Wheeler-Ansatz	54
3.2.2	Diskussion von inhomogenen Fredholm-Integralgleichungen 1. Art	55

3.2.2.1	Der Kern und die rechte Seite der Hill-Wheeler-Gleichung	58
3.2.3	Lösung der modifizierten Hill-Wheeler-Gleichung	65
3.2.3.1	Funktionen von beschränkter Variation	65
3.2.3.2	Die Bedeutung der Gewichtsfunktion	67
3.2.3.3	Die Rolle des Modellpotentials	73
3.2.4	Diskretisierung der Hill-Wheeler-Gleichung	78
3.2.4.1	Numerische Integrationsmethoden	79
3.2.4.2	Numerische Lösungsverfahren	80
3.3	Der Zusammenhang der Hill-Wheeler-Gleichung mit dem Hulthén-Kohn'schen Variationsprinzip	83
4.	Numerische Lösung der Hill-Wheeler-Gleichung	87
4.1	Zur Diskretisierung einer inhomogenen Fredholm-Integralgleichung 1. Art	87
4.2	Die diskretisierte Hill-Wheeler-Gleichung als schlecht konditioniertes Gleichungssystem	89
4.2.1	Streuung am kugelsymmetrischen Potentialtopf	92
4.2.2	Die Lösung der diskretisierten Hill-Wheeler-Gleichung	96
4.3	Ansätze zur Verbesserung der schlechten Konditioniertheit	110
4.3.1	Monte-Carlo-Verfahren	110
4.3.2	Veränderung der Diskretisierung	111
4.3.3	Änderung des Integralkerns	112
5.	Numerische Ergebnisse	114
5.1	s-Wellen-Streuung am attraktiven Exponentialpotential	114

	Seite
5.2	p-Wellen-Streuung am attraktiven Exponentialpotential
	115
5.3	s-Wellen-Streuung am repulsiven Exponentialpotential
	115
5.4	s-Wellen-Streuung am Morsepotential
	116
6.	Zusammenfassung und Ausblick
	117
7.	Anhang
	122
7.1	Liste der verwendeten Abkürzungen
	122
7.2	Referenzen
	124

1. Einleitung

Zur Beschreibung von Kollektivphänomenen in Kernspaltungsprozessen führten Hill und Wheeler [HW 53] die Generatorkoordinatenmethode (GCM) als pragmatisches Konzept ein. Als Näherungsverfahren bewies diese Methode ihre Effektivität bei der Behandlung gebundener Kernzustände, von Kernstreuprozessen und in letzter Zeit bei der Untersuchung von Phänomenen der Atom- und Molekülphysik. Ihre Fundierung als exaktes quantenmechanisches Verfahren konnte erst in den letzten Jahren nachgewiesen werden.

Ausgangspunkt ist der Hill-Wheeler-Ansatz (HW-Ansatz), der einen quantenmechanischen Zustand $|\psi\rangle$ als Überlagerung von parameterabhängigen, nichtorthogonalen Zuständen $|\phi(\underline{\alpha})\rangle$ beschreibt :

$$|\psi\rangle = \int d\underline{\alpha} \, c(\underline{\alpha}) \, |\phi(\underline{\alpha})\rangle \quad (1.1)$$

Der Parameter $\underline{\alpha}$, der i.a. ein beliebiger Satz von reellen oder komplexen Zahlen α_i ist, heißt Generatorcoordinate (GC). Die Zustände $|\phi(\underline{\alpha})\rangle$ nennt man erzeugende oder Modellzustände und die Funktion $c(\underline{\alpha})$ Gewichts- oder GC-Funktion. Der Zustand $|\psi\rangle$ ist normalerweise eine gebundene oder Kontinuumslösung der stationären Schrödingergleichung (SGl). Geht man mit dem HW-Ansatz in die SGl herein, so erhält man die sog. Hill-Wheeler-Gleichung (HWG):

$$\int d\underline{\alpha} \, \{ H(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) - E N(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) \} c(\underline{\alpha}) = 0$$

mit den Integralkernen

$$\left. \begin{array}{l} H(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) \\ N(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) \end{array} \right\} = \langle \phi(\underline{\beta}) | \left\{ \begin{array}{l} H \\ I \end{array} \right\} | \phi(\underline{\alpha}) \rangle$$

H ist der Hamiltonoperator der SGL, daher heißt der Kern $H(\underline{\beta}, \underline{\alpha})$ Energiekern, der Einheitsoperator I erzeugt den Überlappkern $N(\underline{\beta}, \underline{\alpha})$. Die HWG beschreibt eine unkonventionelle Integralgleichung (IGI), über deren Lösung keine allgemeinen mathematischen Aussagen existieren.

Gehört $|\Psi\rangle$ zum diskreten Spektrum des Hamiltonoperators H, so kann man die Lösung $c(\underline{\alpha})$ der HWG nach Eigenfunktionen des Überlappkerns $N(\underline{\beta}, \underline{\alpha})$ entwickeln [La 75, La 76, TPG 77]. In diesem Fall existieren exakt formulierte Existenz- und Eindeutigkeitsätze für die Gewichtsfunktion $c(\underline{\alpha})$. Diese beschreibt stationäre Werte des Ritz'schen Variationsprinzips

$$\delta E = \delta \left[\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = 0$$

Da dieses Variationsprinzip zusätzlich ein Extremalprinzip darstellt, ist man sicher, daß eine verbesserte "Basis" $|\phi(\underline{\alpha})\rangle$ die Eigenenergien E_i von H genauer approximiert.

Dies sieht im Fall von Kontinuumszuständen $|\Psi\rangle$ entschieden anders aus. Hier gibt es grundsätzlich zwei mögliche Formulierungen des HW-Ansatzes, von denen die zweite Thema dieser Arbeit ist.

1. Bei der Beschreibung komplexer Kernreaktionen wählt man als erzeugende Funktionen antisymmetrisierte gebundene Zustände $\phi_c(\underline{\xi}, \underline{\alpha})$ eines A-Nukleonensystems, das sich aus zwei Clustern, die die einzelnen Kerne repräsentieren, zusammensetzt. Die Koordinate $\underline{\xi}$ ist ein Multiindex für alle dynamischen Variablen des Systems, der Index c bezeichnet die möglichen Streukanäle. Demzufolge ist die Gewichtsfunktion $c(\underline{\alpha})$ des entsprechenden HW-Ansatzes

$$\Psi(\underline{\xi}) = \sum_c \int d\underline{\alpha} c_c(\underline{\alpha}) \phi_c(\underline{\xi}, \underline{\alpha})$$

über eine Integraltransformation mit der Wellenfunktion (WF) der Relativbewegung beider Cluster verknüpft, deren Asymptotik bekannt ist. Dadurch wird es möglich, die HWG als inhomogene Fredholm-Integralgleichung (FIGI) 1. Art zu schreiben.

Man kann zeigen, daß die aus dem obigen HW-Ansatz folgende HWG dem Hulthén-Kohn'schen Variationsprinzip genügt.

2. In dieser Arbeit werden zum ersten Mal Kontinuumszustände $\phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$ als Basis zur Beschreibung einer Streulösung $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$ gewählt:

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r}) = \int d\underline{\alpha} \ c(\underline{\alpha}) \ \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) \quad (1.2)$$

Hier verliert die GC-Funktion $c(\underline{\alpha})$ jede physikalisch anschauliche Bedeutung; sie ist lediglich mathematisch als Element des Funktionenraums $\mathcal{L}_1$, des Raumes der absolut integrierbaren Funktionen, zu verstehen.

Die Formulierung der GCM mit dem HW-Ansatz (1.2) ist mit einer Transformation der Lösung $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$ der SGI im quantenmechanischen Hilbertraum (HR) auf eine Lösung $c(\underline{\alpha})$ der HWG im Banachraum (BR) $\mathcal{L}_1$ verbunden. Während die $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$ auf die δ -Funktion normierbar sind, ist im BR ein Skalarprodukt für die Gewichtsfunktion $c(\underline{\alpha})$ nicht definiert. Daher ist die resultierende HWG mit in der Quantenmechanik üblichen Verfahren nicht zu lösen.

Man kann zeigen, daß die resultierende HWG das Hulthén-Kohn'sche Variationsprinzip nicht erfüllt, während ein modifizierter HW-Ansatz der Form

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r}) = \int d\underline{\alpha} \ c(\underline{\alpha}) \ \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) - C \ e^{i\underline{k}\underline{r}} \quad (1.3)$$

eine HWG

$$\int d\underline{\alpha} \ K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) \ c(\underline{\alpha}) = C \ g(\underline{\beta})$$

liefert, deren Lösung $c(\underline{\alpha})$ stationären Werten des Hulthén-Kohn'schen Variationsprinzips entsprechen. Der Kern $K(\underline{\beta}, \underline{\alpha})$ und die rechte Seite der HWG sind definiert als

$$K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) = \int d^3 \underline{r} \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\beta}, \underline{r}) [V(\underline{r}) - v(\underline{\alpha}, \underline{r})] \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$$

und

$$g(\underline{\beta}) = \int d^3 \underline{r} e^{i \underline{k} \underline{r}} V(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\beta}, \underline{r})$$

$v(\underline{\alpha}, \underline{r})$ bezeichnet das zur erzeugenden Funktion $\phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$ gehörige Modellpotential. Die komplexe Konstante C kann man als Korrekturgröße der freien Bewegung auffassen.

Eine generelle Konsequenz des HW-Ansatzes ist die Transformation der SGI, die ein sog. korrekt gestelltes Problem darstellt, auf eine FIGl 1. Art, die ein inkorrekt gestelltes Problem ist. Man bezeichnet ein Problem dann als korrekt gestellt [La 67], wenn für eine Gleichung

$$A f = g$$

mit dem linearen Operator A , der einen BR F auf einen anderen BR G abbildet,

- a) eine Lösung $f \in F$ der Gleichung für beliebiges $g \in G$ existiert
- b) die Lösung eindeutig in F ist
- c) die Lösung stetig von der rechten Seite g abhängt.

Mit anderen Worten ist ein Problem dann korrekt gestellt, wenn eine Funktion $B g$ existiert (B ist der zu A inverse Operator), die für alle $g \in G$ definiert und stetig und die zu $A f$ inverse Funktion ist.

Üblicherweise löst man die HWG durch Diskretisierung und setzt dabei voraus, daß die Lösung der IGI durch die Lösung eines linearen Gleichungssystems

$$A \underline{c} = \underline{b}$$

genähert werden kann. Diese Annahme ist i. a. unrealistisch, da die HWG u. U. ein inkorrekt gestelltes Problem ist, dessen Dis-

kretisierung auf ein schlecht konditioniertes Gleichungssystem führt. Die Lösung c dieses Gleichungssystems kann mit großen numerischen Rundungsfehlern behaftet sein.

In dieser Arbeit wird diese Problematik am Beispiel der Streuung an ausgewählten Zentralpotentialen untersucht. Man kommt zu dem erstaunlichen Ergebnis, daß die numerische Instabilität des algebraischen Gleichungssystems nur bedingte Wirkung auf die physikalisch interessanten Größen, nämlich die Streuphase und die WF hat. Die untersuchten Zentralpotentiale, das anziehende und abstoßende Exponentialpotential (Exp-Potential) und das Morsepotential, zeigen deutlich die Effektivität, aber auch die begrenzte Anwendbarkeit der GCM auf Streuprobleme auf.

Die gewonnenen Resultate ermutigen dazu, den hier gewählten HW-Ansatz zur Beschreibung komplizierterer Streuvorgänge zu verwenden. Zunächst bieten sich Stöße zusammengesetzter Systeme an. Die erzeugenden Funktionen $\phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$ beschreiben in diesem Fall statt eines stationären Zustandes von zwei Clustern einen Streuzustand des Gesamtsystems. Auf diese Weise ist man in der Lage, Streuprozesse der Kern-, Atom- und Molekülphysik als Vielteilchenproblem zu untersuchen, ohne anschauliche Annahmen über das Streuverhalten machen zu müssen.

Außerdem kann man mit der hier gewählten Formulierung der GCM ohne besonderen Aufwand den quantenmechanischen Tunnel-effekt beschreiben; dieser spielt bekanntlich in der Kernphysik vor allem beim α - Zerfall und in der Molekülphysik zur Beschreibung chemischer Reaktionen eine große Rolle. Auch in diesem Fall stellen die erzeugenden Funktionen $\phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$ Streuzustände eines Vielteilchensystems dar.

Die in dieser Arbeit gewählte Formulierung der GCM eröffnet also eine bislang ungenutzte Möglichkeit der Beschreibung quantenmechanischer Streuprozesse.

Im folgenden Kapitel werden bisherige Anwendungen der GCM auf gebundene Probleme und komplexe Kernreaktionen diskutiert. In Kap. 3 wird mit Hilfe des HW-Ansatzes (1.2) eine HWG für Potentialstreuung hergeleitet. Da diese die Struktur einer homogenen FIGl 1. Art besitzt, wird der HW-Ansatz so modifiziert, daß die HWG eine inhomogene IG1 darstellt. Die Lösungen der beiden HWGen sind Elemente des BR $\mathcal{L}_1$ und besitzen Stammfunktionen im BR V^0 , dem Raum der Funktionen von beschränkter Variation (b.V.). Es wird eine mögliche Interpretation der Gewichtsfunktion vorgestellt und die Rolle des Modellpotentials untersucht. Die Lösung der HWGen wird durch die übliche Diskretisierung als Lösung eines Gleichungssystems genähert. Am Ende dieses Kap. wird gezeigt, daß nur der modifizierte HW-Ansatz (1.3) auf eine HWG führt, deren Lösung stationären Werten des Hulthén-Kohn'schen Variationsprinzips entspricht. In Kap. 4 wird die numerische Lösung der HWG diskutiert. Insbesondere wird gezeigt, daß die resultierenden Gleichungssysteme schlecht konditioniert sind. D. h. die numerische Lösung ist i.a. mit erheblichen Rundungsfehlern behaftet und daher nur zufällig eine Näherung der Gewichtsfunktion. Trotzdem erweisen sich die berechneten WFn und Streuphasen als sehr gute Näherung der exakten Lösung. In Kap. 5 werden die mit der GCM berechneten Streuphasen mit der exakten Streuphase und anderen Näherungen verglichen. In Kap. 6 wird eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit gegeben. Schließlich werden mögliche Erweiterungen der hier vorgestellten Formulierung der GCM aufgezeigt.

2. Die GCM und ihre bisherigen Anwendungsgebiete

Die GCM wurde erstmals 1953 von Hill und Wheeler [HW 53] zur Beschreibung von Kernspaltungsprozessen, bei denen Kollektivschwingungen mit großer Amplitude auftreten, formuliert. 1957 diskutierten Griffin und Wheeler [GH 57] Näherungsverfahren zur Lösung der stationären Vielteilchen-SGL im Rahmen dieser Methode. Die eingeführten GCen waren Parameter, die die Kollektivbewegung eines A-Teilchensystems beschrieben. Die Effektivität der GCM legte eine Untersuchung von vielfältigen Prozessen nahe, die im Rahmen der zeitunabhängigen SGL beschreibbar sind.

Hauptsächlich findet diese Methode in der Vielteilchenphysik Anwendung, da man hofft, mit dem speziell gewählten Ansatz für die WF das kollektive Verhalten aller Teilchen zu erfassen. Dennoch ist die GCM ein exaktes quantenmechanisches Verfahren, das prinzipiell zur Beschreibung aller quantenmechanischen Phänomene geeignet ist. Hierbei wird der Versuch gemacht, durch eine Überlagerung ausgewählter, parameterabhängiger Zustände, die nicht notwendig linear unabhängig sind, einen Zustand im HR darzustellen, der Lösung der SGL ist. Der entscheidende Nachteil dieses Verfahrens liegt darin begründet, daß die zu lösenden Gleichungen i. a. inkorrekt gestellte Probleme sind [La 67] .

Um die mathematischen Schwierigkeiten genauer kennenzulernen, untersuchte man Modellprobleme mit exakt bekannter Lösung, u. a. den harmonischen Oszillator [La 76, CDT 78, Fi 78, RS 80] , das H-Atom [CDT 78] , das Lipkin-Modell [LL 77, TPG 77, RS 80] und den linearen Stark-Effekt [CDT 81] im H-Atom.

Wählt man die GCen als ein bestimmtes System typischer Größen, die eine nicht notwendig anschauliche Bedeutung besitzen, so lassen sich viele Probleme der Kern-, Atom- und Molekülphysik diskutieren.

In der Kernphysik konnte man erfolgreich gebundene Probleme diskutieren, die in den Review-Artikeln [FIZ 72, Wo 75, BL 75, FIZ 77] zusammengefaßt sind. Eine weitere Formulierung der GCM

für gebundene Probleme findet man in [MP 78], wo man Kerne durch eine Überlagerung von mehreren Clustern darstellt. Auch spezielle Probleme wie Riesenresonanzen lassen sich beschreiben [RS 80, TPT 80]. Weitere Anwendung fand die GCM für die Bosonenentwicklung [RS 80]. Kern- Kern-Reaktionen wurden mit Hilfe der GCM ausführlich untersucht. Literaturhinweise findet man in [FIZ 72, Wo 75, BL 75, FIZ 77, Fr 81]. Ein detailliert analysiertes Modellproblem für Kernreaktionen ist die Streuung einer Gauß-Funktion an einem Gauß'schen Potential [HWW 77]. Vielkanalstreu Probleme lassen sich im Rahmen der R-Matrix-Formulierung der GCM [BHL 74, BHL 77] darstellen, die effektiver ist als die übliche Cluster-Darstellung. Weiterhin hat die GCM große Bedeutung bei der Diskussion von Kernspaltungsprozessen [GR 80], für die sie auch ursprünglich formuliert wurde [HW 53, GW 57]. Neuerdings werden Versuche angestellt, die GCM zur Herleitung von mikroskopischen Kern-Kern-Potentialen zu benutzen [BS 79, Fr 81]. Schließlich ist sie geeignet, zerfallende Zustände zu beschreiben, z. B. den α -Zerfall [FW 76].

In den letzten Jahren hat man die GCM auf Probleme der Atom- und Molekülphysik übertragen. Speziell beschrieb man stationäre Atomzustände [CDT 78, Fi 78, Th 81] und stationäre Molekülzustände, die man im Rahmen der adiabatischen oder diabatischen Näherung darstellen kann [LLB 77, La 78, La 79, LL 79, DNS 81].

Weiter oben wurde erwähnt, daß die GCM auf inkorrekt gestellte Probleme führt. Das bedeutet, daß die Gewichtsfunktion im HW-Ansatz für die WF bei konkreten Rechnungen kein reguläres Verhalten zeigt. Dieses Problem wurde in der Literatur mehrfach diskutiert und kann nur durch eine Erweiterung des Ansatzes behoben werden. Möglichkeiten bietet die Einführung von komplexen GCen [Wo 70, La 74, RS 80], die auf eine Lösung der HWG im Bargmann-Raum führt, oder von konjugierten GCen [Wo 73, PTP 80]. Beide Varianten erzeugen Gewichtsfunktionen, die "gutartig" sind. In der Praxis wurden solche Theorien jedoch nur selten verwendet, da sie mit erheblich größerem numerischen Aufwand verknüpft sind.

Verallgemeinernd läßt sich die GCM als ein quantenmechanisches Verfahren definieren, bei dem durch die spezielle Wahl der Basis für die Darstellung der WF - im Gegensatz zur üblichen Lösung der SGL mit quadratintegrablen Funktionen im HR - Lösungen auftreten, die nicht im HR liegen und ein ungewohnt instabiles Verhalten zeigen. Dies soll im folgenden Abschnitt ausführlicher diskutiert werden.

2.1 Der GCM-Ansatz für die Wellenfunktion

Die GCM ist ein Variationsverfahren zur Beschreibung eines quantenmechanischen Zustandes $|\Psi\rangle$ in einer nicht orthogonalen Basis $|\phi(\underline{\alpha})\rangle$. Grundlage dieser Methode ist der HW-Ansatz (1.1), in dem die Integration über alle Real- und Imaginärteile von $\underline{\alpha}$ ausgeführt wird:

$$d\underline{\alpha} = d\alpha_1 d\alpha_2 \dots d\alpha_n$$

Der HW-Ansatz (1.1) soll i. a. Lösung der zeitunabhängigen SGL

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.1)$$

sein. Daher ist er keine triviale Gleichung, denn die erzeugenden Funktionen $|\phi(\underline{\alpha})\rangle$ sollten den Zustandsraum der Lösung $|\Psi\rangle$ der SGL (2.1) aufspannen. Man muß die rechte Seite von (1.1) so wählen, daß der gesuchte Zustand $|\Psi\rangle$ beschrieben werden kann.

Einsetzen des HW-Ansatzes in die SGL und Projektion auf den Zustand $\langle\phi(\beta)|$ ¹ ergibt die HWG:

$$\int d\underline{\alpha} \{ H(\underline{\alpha}, \gamma) - E N(\underline{\alpha}, \gamma) \} c(\gamma) = 0 \quad (2.2)$$

¹ Im folgenden beschränke ich mich o. B. d. A. auf einen reellen Parameter α , der auf einem endlichen oder unendlichen Intervall definiert ist.

Sie ist eine IGL, die zwei Kerne $H(\beta, \alpha)$ und $N(\beta, \alpha)$ enthält. Um ihre Lösung zu diskutieren, muß man sie auf eine konventionelle IGL transformieren.

Häufig wird die Frage nach der Bedeutung der GC-Funktion $c(\alpha)$ gestellt. Aufgrund des HW-Ansatzes (1.1) kann man bereits vor der Lösung der HWG Aussagen über $c(\alpha)$ machen:

Der HW-Ansatz (1.1) lautet in einer speziellen Darstellung, z. B. der Ortsdarstellung

$$\Psi(\underline{x}) = \int d\alpha \, c(\alpha) \, \phi(\underline{x}, \alpha) \quad (2.3)$$

Diese Beziehung kann als inhomogene FIGl 1. Art interpretiert werden, die man formal als lineare Operatorgleichung der Form

$$K f = g \quad (2.4)$$

schreiben kann. Dem Integraloperator K ist der Kern $\phi(\underline{x}, \alpha)$ zugeordnet, f und g sind i. a. Elemente eines BR, denen die Funktionen $c(\alpha)$ bzw. $\Psi(\underline{x})$ korrespondieren. Derartige Gleichungen stellen normalerweise inkorrekt gestellte Aufgaben dar, da der zu K inverse Operator K^{-1} meist unbeschränkt ist, auch wenn K selbst stetig und beschränkt ist [KF 75, S. 471]. Folglich kann eine sehr kleine Änderung von g eine beliebig große Störung in f verursachen [La 67, Mi 75]. Über die Lösung von (2.4) lassen sich keine generellen Aussagen formulieren. Man stellt lediglich fest, daß FIGlen 1. Art große Ähnlichkeiten mit sehr schlecht konditionierten (oder sogar singulären) Gleichungssystemen aufweisen und der Versuch, (2.4) durch Diskretisierung zu lösen, meistens auf stark oszillierende Lösungen f führt, die selten der exakten Lösung entsprechen [IGL].

Da eine kleine Änderung δg der rechten Seite von (2.4) mit beliebigen Instabilitäten der Lösung f verbunden ist, g jedoch i. a. eine glatte Funktion darstellt, muß der Integraloperator K mit dem Kern $\phi(\underline{x}, \alpha)$ glättende Eigenschaften besitzen, die jegliche Unstetigkeit und Irregularität von f aufheben. Selbstver-

ständig hat (2.4) nur dann eine Lösung, wenn g im Wertebereich des Operators K liegt. Diese Aussage ist mit der physikalischen Tatsache verknüpft, daß mit dem HW-Ansatz (2.3) eine Lösung der zeitunabhängigen SGL $\Psi(\underline{x})$ dargestellt werden soll.

Exakte mathematische Aussagen lassen sich für den Fall formulieren, daß dem Operator K ein quadratintegrabler Kern zugeordnet und $g \in \mathcal{L}_2$ ist. Hier gilt das Theorem von Picard

[Sm 58, S. 164]:

Sei (u_n, v_n, λ_n) ein singuläres System des $\mathcal{L}_2$ -Kerns $K(s, t)$, sei ferner $y(s)$ eine gegebene $\mathcal{L}_2$ -Funktion, dann hat die IGL

$$y(s) = \int K(s, t) x(t) dt \quad \text{f.ü.}$$

eine $\mathcal{L}_2$ -Lösung $x(t)$ genau dann, wenn

a)

$$\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 |(y, u_n)|^2 < \infty$$

und

b) $(y, u) = 0$ für jede $\mathcal{L}_2$ -Funktion u gilt, für die

$$K^+ u = 0 \quad \text{f.ü.}$$

Falls der IGL-Kern und die Funktion $y(s)$ stetig und quadratintegrabel sind, kann man die Gleichungen mit der Einschränkung f.ü. als gewöhnliche Gleichungen verstehen. Aber auch dann muß die quadratintegrable Lösung nicht stetig sein [Sm 58, S. 165]. Eindeutig ist die Lösung $x \in \mathcal{L}_2$ genau dann, wenn $K x = 0$ (f.ü.) impliziert, daß $x = 0$ (f.ü.), d. h. die $\{v_n\}$ ein vollständiges orthonormales Funktionensystem bilden. Zu bemerken ist weiterhin, daß nicht zu jedem $y \in \mathcal{L}_2$ ein $x \in \mathcal{L}_2$ existieren muß. Falls nämlich auch die $\{u_n\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, divergiert die Reihe

$$\sum_n \lambda_n^2 |(y, u_n)|^2.$$

Diese Aussagen sind bei der Untersuchung von stationären Problemen von Bedeutung. Dort ist man normalerweise in der Lage, die Modellfunktion $\phi(\underline{x}, \alpha)$ durch Multiplikation mit einer quadratintegrablen Funktion $R(\alpha)$ zu einem quadratintegrablen Kern umzuschreiben [La 76]:

$$\int |\bar{\phi}(\underline{x}, \alpha)|^2 dx d\alpha = ||\bar{\phi}|| < \infty, \text{ wo } \bar{\phi}(\underline{x}, \alpha) = R(\alpha) \phi(\underline{x}, \alpha)$$

Beispielsweise kann man bei der "Gaussian Overlap Approximation" (GOA) $R(\alpha) = \{\exp -r\alpha^2\}$ setzen, wo r ein beliebig zu wählender positiver Parameter ist.

Ein äquivalentes Verfahren zur Konstruktion quadratintegrabler erzeugender Funktionen $\bar{\phi}(\underline{x}, \alpha)$ ist die Transformation der GC mit Hilfe bestimmter monotoner, stetiger Funktionen $m: \beta = m(\alpha)$ [TP 78].

Beschreibt $\Psi(\underline{x})$ in (2.3) einen gebundenen Zustand, so ist $\Psi(\underline{x}) \in \mathcal{L}_2$; der Integralkern $\bar{\phi}(\underline{x}, \alpha)$ ist quadratintegrabel. Damit besitzt die Gewichtsfunktion

$$\tilde{c}(\alpha) = c(\alpha)/R(\alpha)$$

alle Eigenschaften der Lösung $x(t)$ der obigen FIG1. Folglich ist die GC-Funktion $c(\alpha)$ in (2.3) mindestens dann quadratintegrabel, wenn $\tilde{c}(\alpha)$ eine stetige und beschränkte Funktion ist, da das Produkt einer quadratintegrablen Funktion mit einer stetigen beschränkten Funktion zu $\mathcal{L}_2$ gehört [Ri 78, S. 81 f.] .

Man kann jedoch leicht erkennen, daß $\tilde{c}(\alpha)$ nur ausnahmsweise so gutartige Eigenschaften besitzt [Mi 75], was im Rahmen der Formulierung (2.4) gezeigt werden soll: Es seien $g \in \mathcal{L}_2$ und K auf $\mathcal{L}_2$ definiert; g sei eine eindeutige Lösung von (2.4), dann besitzt der Kern des Operators K unendlich viele Eigenwerte $\mu_n = \lambda_n^{-1}$ mit dem Häufungspunkt Null. Eine kleine Änderung δg_n der Größe $g_n = (g, u_n)$ erzeugt in f die Störung

$$\delta f = \left(\frac{\delta g_n}{\mu_n} \right) v_n$$

d. h. die relative Änderung im Betrag von f : $\frac{||\delta f||}{||\delta g||}$ ist beliebig groß.

Dieses instabile Lösungsverhalten legt es nahe, nach Methoden zu suchen, die glatte Funktionen f als Lösung der Gleichung (2.4) im Raum $\mathcal{L}_2$ liefern. Eine sehr erfolgreiche Methode ist das Regularisierungsverfahren von Tihonov [Ti 63], bei dem die Lösung der IGl (2.4) der Lösung eines Variationsprinzips entspricht, das eine korrekt gestellte Aufgabe im Sinne von Tihonov [La 67] ist. Diese Regularisierungsmethode liefert beliebig genaue glatte Lösungen der FIGl 1. Art und ist im HR mit der Entwicklung des Integralkerns nach seinem singulären System äquivalent [Hi 76]. Bislang wurde dieses Verfahren zur Lösung der HWG jedoch nicht angewendet, so daß man hier die in der Literatur beschriebenen sehr instabilen Gewichtsfunktionen $c(\alpha)$ erhält.

2.2 Behandlung gebundener Probleme

Die HWG (2.2) genügt dem Ritz'schen Variationsprinzip, wenn man mit dem Ansatz (1.1) gebundene Zustände beschreiben möchte. Die Lösung von (2.2) genügt in diesem Fall der Variationsgleichung

$$\delta E = \delta \left[\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right] = 0$$

Setzt man nämlich (1.1) in dieses Funktional ein und variiert nach $c^*(\alpha)$, so erhält man die HWG (2.2), die man in Operatorform schreiben kann als

$$(H - E) c = 0 \quad (2.5)$$

H ist ein Integraloperator mit dem Kern $H(\beta, \alpha)$, N ein Operator mit Kern $N(\beta, \alpha)$ und c der Lösungsvektor im GC-Raum. Formal läßt sich diese Gleichung leicht auf die Form einer SGl bringen, die mit Standardverfahren zu lösen wäre:

Sei X eine Quadratwurzel des Überlappoperators N und definiert als

$$X^+ X = N$$

Multipliziert man Gleichung (2.5) von links mit dem Operator $(X^{-1})^+$

$$\{(X^{-1})^+ H X^{-1} X - E (X^{-1})^+ X^+ X\} c = 0$$

so erhält man eine Operatorgleichung von der Form der SGI:

$$(\hat{H} - E \hat{N}) \hat{c} = 0 \quad (2.6)$$

wo $\hat{H} = (X^{-1})^+ H X^{-1}$

$$\hat{N} = (X^{-1})^+ X^+$$

$$\hat{c} = X c$$

ist.

Leider ist diese Transformation der HWG auf eine SGI normalerweise nur formal möglich, da der Operator X^{-1} i. a. nicht beschränkt ist. Man muß daher andere Verfahren finden, mit denen man den Überlappkern der HWG (2.2) diagonalisieren kann.

2.2.1 Lösungsmethode der HWG nach Lathouwers

In Abschnitt 2.1 wurde erwähnt, daß die Modell-WF $\phi(\underline{x}, \alpha)$ immer derart wählbar ist, daß sie einen nicht symmetrischen Kern darstellt, dem ein Integraloperator auf $\mathcal{L}_2$ entspricht. Mit Hilfe solcher Kerne kann man immer zwei symmetrische und positive Kerne definieren [ZKK 75, S. 64], einen rechts- und linksiterierten Kern:

$$N(\beta, \alpha) = \int d\underline{x} \phi(\underline{x}, \beta) \phi(\underline{x}, \alpha) \quad , \text{ formal } N = \phi \phi^+$$

und

$$S(\underline{x}', \underline{x}) = \int d\alpha \phi(\underline{x}', \alpha) \phi(\underline{x}, \alpha) \quad , \text{ formal } S = \phi \phi^+$$

[La 75, La 76, TPG 77] diskutieren die Lösung der HWG (2.2) mit

Hilfe der Eigensysteme von N und S im Detail. Ihre Ergebnisse seien hier nur zusammengefaßt:

N und S besitzen dieselben Eigenwerte μ_n , die positiv und reell sind. Null ist ihr einzig möglicher Häufungspunkt. Ihr Eigenwertspektrum ist endlich, wenn $N(\beta, \alpha)$ und $S(\underline{x}', \underline{x})$ ausgeartete Kerne bilden, d. h. es gilt

$$N(\beta, \alpha) = \sum_{i=1}^M f_i(\beta) g_i(\alpha)$$

und eine entsprechende Beziehung für $S(\underline{x}', \underline{x})$. Andernfalls ist das Eigenwertspektrum abzählbar unendlich. Die Eigenfunktionen $b_n(\alpha)$ und $y_n(\underline{x})$, die den Eigenwertgleichungen

$$N b_n = \mu_n b_n$$

und $S y_n = \mu_n y_n$

genügen, bilden ein orthonormales Funktionensystem, d. h.

$$\sum_n b_n^*(\beta) b_n(\alpha) = \delta(\beta - \alpha) \quad , \quad \int d\alpha b_n(\alpha) b_m^*(\alpha) = \delta_{nm}$$

$$\sum_n y_n^*(\underline{x}') y_n(\underline{x}) = \delta(\underline{x}' - \underline{x}) \quad , \quad \int d^3\underline{x} y_n(\underline{x}) y_m^*(\underline{x}) = \delta_{nm}$$

Die erzeugende Funktion des HW-Ansatzes (2.3) ist darstellbar als

$$\phi(\underline{x}, \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n^{1/2} y_n(\underline{x}) b_n^*(\alpha)$$

Die Quadratwurzel X von N und ihr Inverses X^{-1} lassen sich darstellen als

$$X(\beta, \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \mu_n^{1/2} b_n(\alpha) b_n^*(\beta)$$

$$X^{-1}(\beta, \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \mu_n^{-1/2} b_n(\alpha) b_n^*(\beta)$$

Die letzte Gleichung zeigt, daß X^{-1} im Fall $\mu_n \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$ nicht beschränkt ist. Folglich kann man die HWG (2.5) nur so lange auf die SGI (2.6) transformieren, wie $\mu_n \neq 0, \forall n$ ist. Der SGI (2.6) entspricht bei diesem Lösungsverfahren das unendliche Gleichungssystem

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_{mn} \tilde{c}_n = E \tilde{c}_m, \quad \forall m$$

Zwischen der Lösung $\tilde{c} = \{\tilde{c}_n\} \in l_2$ dieser Gleichung und der Lösung der HWG (2.2) besteht die Beziehung

$$c(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n}{\mu_n^{1/2}} b_n(\alpha) \quad (2.7)$$

$c(\alpha)$ ist dann quadratintegabel, wenn die Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\tilde{c}_n|^2}{\mu_n} \quad (2.8)$$

konvergiert.

2.2.2 Der GC-Raum als Unterraum des Vielteilchen-Hilbertraums

Man kann beweisen [TPG 77], daß die Vielteilchen-WFen, die durch den HW-Ansatz darstellbar sind, einen linearen Unterraum des Vielteilchen-HR bilden. Dieser GC-Raum $\mathcal{H}_c$ ist nur abgeschlossen, wenn das Eigenwertspektrum von N und S endlich ist.

Die Eigenfunktionen y_n des Operators S , die der Relation

$$|n\rangle = \mu_n^{-1/2} \int d\alpha |\phi(\alpha)\rangle b_n(\alpha) \quad (2.9)$$

genügen, bilden einen abgeschlossenen Unterraum des Vielteilchen-HR, den sog. kollektiven Unterraum $\mathcal{H}_c$. $|n\rangle$ sei hier der Dirac-Vektor, der der Eigenfunktion y_n des Operators S entspricht. $\mathcal{H}_c$ ist der kleinste HR, der die erzeugenden Zustände $|\phi(\alpha)\rangle$ enthält. Die Projektion des Vielteilchen-HR, der durch die Lösung der SGI (2.1) aufgespannt wird, auf den kollektiven Unterraum $\mathcal{H}_c$ ist gegeben durch den Projektor

$$P_c = \sum_{n, \mu_n \neq 0} |n\rangle \langle n|$$

Jeder Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_c$ ist entwickelbar nach den Vektoren $|n\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n, \mu_n \neq 0} \tilde{c}_n |n\rangle, \quad \text{mit} \quad \sum_{n, \mu_n \neq 0} |\tilde{c}_n|^2 = 1 \quad (2.10)$$

Andererseits zeigte Gleichung (2.7), daß jedes Element $c(\alpha)$ des GC-Raumes $\mathcal{H}_\alpha$ nach Eigenfunktionen von N entwickelt werden kann. Setzt man nun (2.9) in (2.10) ein und berücksichtigt (2.7), so erkennt man sofort, daß der durch den HW-Ansatz (1.1) aufgespannte GC-Raum $\mathcal{H}_\alpha$ genau dann mit dem kollektiven Unterraum $\mathcal{H}_c$ zusammenfällt, wenn die Reihe (2.8) konvergiert. Im Fall einer Divergenz von (2.8) gibt es Zustände in $\mathcal{H}_c$, die nicht zu $\mathcal{H}_\alpha$ gehören.

Falls $\mathcal{H}_\alpha$ und $\mathcal{H}_c$ gleich sind, kann man einen Funktionenraum konstruieren, dessen Elemente $|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle$ zu den erzeugenden Funktionen $|\phi(\alpha)\rangle$ biorthogonal sind [Wo 70], d. h. die Relation

$$\langle \tilde{\phi}(\beta) | \phi(\alpha) \rangle = \delta(\beta - \alpha) = \sum_{n, \mu_n \neq 0} b_n^*(\beta) b_n(\alpha)$$

erfüllt ist. Der Projektionsoperator

$$P_{\perp}(\beta, \alpha) = \sum_{n, \mu_n \neq 0} b_n^*(\beta) b_n(\alpha)$$

projiziert den Eigenraum des Operators N auf den Unterraum, der durch die Eigenfunktionen $b_n(\alpha)$ mit $\mu_n \neq 0$ aufgespannt wird. Mit Hilfe der $b_n(\alpha)$ lassen sich die Biorthogonalzustände $|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle$ darstellen als

$$|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle = \sum_{n, \mu_n \neq 0} \mu_n^{-1/2} b_n^*(\alpha) |n\rangle$$

Sie gehören i. a. nicht zum Vielteilchen-HR, da ihre Norm

$$\langle \tilde{\phi}(\beta) | \tilde{\phi}(\alpha) \rangle = \sum_{n, \mu_n \neq 0} \frac{b_n^*(\alpha) b_n(\beta)}{\mu_n}$$

wegen des Häufungspunktes $\mu = 0$ nicht endlich ist. Nur bei endlichem Eigenwertspektrum von N besitzen die Zustände $|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle$ eine endliche Norm.

Die anschauliche Bedeutung der $|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle$ erkennt man, wenn man den HW-Ansatz (1.1) mit $\langle \tilde{\phi}(\beta) |$ multipliziert

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi}(\beta) | \Psi \rangle &= \int d\alpha c(\alpha) \langle \tilde{\phi}(\beta) | \phi(\alpha) \rangle = \\ &= \int d\alpha c(\alpha) \delta(\beta - \alpha) = c(\beta) \end{aligned}$$

Die Zustände $|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle$ sind genau die Zustände, für die die Gewichtsfunktion $c(\alpha)$ eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation erlaubt. Anders formuliert: $c(\alpha)$ mißt den Überlapp des Zustandes $|\Psi\rangle$ mit dem zu $|\phi(\alpha)\rangle$ biorthogonalen Zustand $|\tilde{\phi}(\alpha)\rangle$.

2.3 Behandlung komplexer Kernreaktionen

In Abschnitt 2.2 wurde die HWG (2.2) zur Beschreibung gebundener Probleme aus dem Ritz'schen Variationsprinzip hergeleitet. Weiter

wurde gezeigt, daß der GC-Raum i. a. mit dem kollektiven Unterraum des Vielteilchen-HR zusammenfällt. Im folgenden wird die GCM für komplexe Kernreaktionen beschrieben und die entsprechende HWG aus dem Kohn'schen Variationsprinzip hergeleitet.

Gewöhnlich beschränkt man sich bei der Betrachtung von Kernstreuungsprozessen auf die Streuung zweier Kerne mit den Nukleonenzahlen A_1 und A_2 . Dies ist ein Vielkanalproblem, das i. a. nicht vollständig lösbar ist. Spaltet man den HR von $A = A_1 + A_2$ Nukleonen in einen Unterraum P und den dazu komplementären orthogonalen Unterraum Q auf, so lautet die SGI im Feshbach-Formalismus GLO 75 :

$$(E - \mathcal{H}_{PP}) \psi_P = \mathcal{H}_{PQ} \psi_Q$$

$$(E - \mathcal{H}_{QQ}) \psi_Q = \mathcal{H}_{QP} \psi_P$$

Elimination von ψ_Q ergibt als exakte SGI für ψ_P

$$(E - \mathcal{H}'_{PP}) \psi_P = 0 \quad (2.11)$$

mit dem effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}'_{PP} = \mathcal{H}_{PP} + \mathcal{H}_{PQ} (E + i\epsilon - \mathcal{H}_{QQ})^{-1} \mathcal{H}_{QP} \quad (2.12)$$

Man kann nun zur Lösung von (2.11) als HW-Ansatz für die WF ψ_P ansetzen:

$$\psi(\underline{\xi}) = \sum_c \int d\underline{\alpha} c_c(\underline{\alpha}) \phi_c(\underline{\xi}, \underline{\alpha}) \quad (2.13)$$

Der Index c bezeichnet alle möglichen Streukanäle, $\underline{\alpha}$ ist die GC, $\underline{\xi}$ ein Multiindex für alle dynamischen Variablen des Systems und $\phi_c(\underline{\xi}, \underline{\alpha})$ beschreibt einen antisymmetrisierten Zustand des A-Nukleonensystems.

Um eine physikalische Interpretation der Gewichtsfunktion $c_c(\underline{\alpha})$ zu gewinnen, müssen die erzeugenden Funktionen $\phi_c(\underline{\xi}, \underline{\alpha})$ als Produkt einer WF $u_c(\underline{x}_A)$ der Relativbewegung beider Kerne und

einer WF $\phi_C^{\text{int}}(\underline{\eta}^A)$, die die intrinsische Bewegung der Nukleonen in beiden Kernen beschreibt, darstellbar sein. Dafür brauchbare Modellfunktionen sind Peierls-Yoccoz- (PY-) bzw. Peierls-Thouless- (PT-) projizierte Zustände [PY 57, PT 62].

Zunächst soll gezeigt werden, wie man ein System von A Nukleonen in einem beliebigen, festen Koordinatensystem (KOS) beschreiben kann [GH 81, HG 81]. Gewöhnlich wählt man als WF des A-Nukleonensystems eine Slaterdeterminante der Form

$$\phi_C^A(\underline{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \left[\chi_{C_1}^A(\underline{\xi}_1) \chi_{C_2}^A(\underline{\xi}_2) \dots \chi_{C_A}^A(\underline{\xi}_A) \right]$$

Hier sind die $\chi_{C_i}^A$ Einteilchen-WFen und die $\underline{\xi}_i$ Einteilchen-Koordinaten bezüglich eines festen KOS. $\underline{\xi} = \{\underline{\xi}_i\}$ ist der Satz aller Einteilchen-Koordinaten.

Falls $\phi_C^A(\underline{\xi})$ in ein Produkt einer WF $G_C^A(\underline{x}_A)$ für die Schwerpunkts- (CM-)Bewegung und einer WF $\phi_C^{\text{int}}(\underline{\eta}^A)$ für die intrinsische Bewegung faktorisiert:

$$\phi_C^A(\underline{\xi}) = G_C^A(\underline{x}_A) \phi_C^{\text{int}}(\underline{\eta}^A) \quad (2.14)$$

mit

$$\underline{x}_A = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \underline{\xi}_i \quad \text{und} \quad \underline{\eta}^A = \{\underline{\eta}_i^A\}, \quad \underline{\eta}_i^A = \underline{\xi}_i - \underline{x}_A$$

kann man die Gesamt-WF (2.13) als Überlagerung von PY-Zuständen darstellen:

$$\psi(\underline{\xi}) = \sum_C \phi_C^{\text{PY}}(\underline{\xi}) \quad (2.15)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi_C^{\text{PY}}(\underline{\xi}) &= \int d^3 \underline{R}_A c_C(\underline{R}_A) \phi_C^A(\underline{\xi} - \underline{R}_A) \\ &= u_C^{\text{PY}}(\underline{x}_A) \phi_C^{\text{int}}(\underline{\eta}^A) \end{aligned}$$

ϕ_C^{int} hängt nur von den intrinsischen Koordinaten $\underline{\eta}^A$ ab und $u_C^{\text{PY}}(\underline{x}_A)$ beschreibt die CM-Bewegung. $\underline{R}_A$ spielt die Rolle der GC und entspricht dem Erwartungswert von $\underline{x}_A$. Den Zusammenhang zwischen der CM-WF u_C^{PY} und der Gewichtsfunktion $c_C(\underline{R}_A)$ liefert die Beziehung

$$u_C^{\text{PY}}(\underline{x}_A) = \int d^3 \underline{R}_A c_C(\underline{R}_A) G_C(\underline{x}_A - \underline{R}_A) \quad (2.16)$$

$G_C(\underline{x}_A - \underline{R}_A)$ ist ein Wellenpaket, das die Schwankungen von $\underline{x}_A$ um die GC $\underline{R}_A$ beschreibt, die in $\phi_C^A(\underline{\xi} - \underline{R}_A)$ enthalten sind [HWW 77].

Falls die Faktorisierung (2.14) nicht möglich ist, kann man $\psi(\underline{\xi})$ als Überlagerung von PT-Zuständen darstellen:

$$\psi(\underline{\xi}) = \sum_C \phi_C^{\text{PT}}(\underline{\xi}) \quad (2.17)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi_C^{\text{PT}}(\underline{\xi}) &= \int d^3 \underline{K}_A \int d^3 \underline{R}_A c_C(\underline{K}_A, \underline{R}_A) \exp[i \underline{K}_A (\underline{x}_A - \underline{R}_A)] \phi_C^A(\underline{\xi} - \underline{R}_A) \\ &= u_C^{\text{PT}}(\underline{x}_A) \phi_{\text{OC}}^{\text{PT}}(\underline{\eta}^A) \end{aligned}$$

Die GC $\underline{K}_A$ ist der Erwartungswert des zur Koordinate $\underline{x}_A$ konjugierten Impulses. $\phi_C^{\text{PT}}(\underline{\xi})$ entspricht genau einer "resonating group method"-WF (RGM-WF), bei der u_C^{PT} die CM-Bewegung und $\phi_{\text{OC}}^{\text{PT}}$ die intrinsische Bewegung der Nukleonen repräsentieren. Dies bedeutet, daß die Zustände (2.17) das kollektive Spektrum genau wiedergeben, während die Entwicklung (2.15) durch den Zusammenhang (2.16) das kollektive Spektrum verzerrt [PTP 80]. Falls $\phi_C^A(\underline{\xi})$ faktorisiert, sind die Darstellungen (2.15) und (2.17) äquivalent [GH 81]. Trotzdem kann es vorteilhaft sein, zwei zueinander konjugierte GCen statt nur einer zu verwenden, da die Gewichtsfunktion im Fall zweier GCen immer als reguläre

Funktion existiert und man im kollektiven Unterraum eine Darstellung finden kann, die bezüglich den erzeugenden Funktionen diagonal ist [PTP 80].

Im folgenden werden die PY- bzw. PT-Zustände zur Beschreibung komplexer Kernreaktionen verwendet, die man als Streuung zweier Cluster mit den Nukleonenzahlen A_1 und A_2 betrachtet. Die beiden

Cluster werden als Slaterdeterminanten $\phi_{c_1}^{A_1}(\underline{\xi})$ und $\phi_{c_2}^{A_2}(\underline{\xi})$ dargestellt. Die Koordinaten

$$\underline{\xi} = \{\underline{\xi}_i, i = 1, 2 \dots A\}, A = A_1 + A_2$$

werden von einem beliebigen Bezugssystem aus gemessen. Da beide

Cluster-WFen $\phi_{c_1}^{A_1}$ und $\phi_{c_2}^{A_2}$ nicht translationsinvariant sind, muß

man sie auf PY- bzw. PT-Zustände projizieren.

Zunächst spaltet man den Hamiltonoperator H_{tot} des Gesamtsystems

$$H_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^A T(\underline{\xi}_i) + \sum_{i<j}^A v(\underline{\xi}_i, \underline{\xi}_j)$$

auf in einen physikalischen Hamiltonoperator H' und einen Operator T_{CM} , der die totale CM-Bewegung bezüglich des gewählten KOS beschreibt:

$$H_{\text{tot}} = H' + T_{\text{CM}}$$

Die totale CM-Bewegung wird absepariert, sodaß man noch Lösungen von (2.11) suchen muß.

Die Slaterdeterminanten der beiden Cluster lauten

$$\phi_{c_1}^{A_1}(\underline{\xi}^{A_1}) = \frac{1}{\sqrt{A_1!}} \det \begin{bmatrix} \chi_{c_1,1}^{A_1}(\underline{\xi}_1^{A_1}) & \chi_{c_1,2}^{A_1}(\underline{\xi}_2^{A_1}) & \dots & \chi_{c_1,A_1}^{A_1}(\underline{\xi}_{A_1}^{A_1}) \end{bmatrix}$$

und entsprechend $\phi_{c_2}^{A_2}(\underline{\xi}^2)$. Die Einteilchenorbitale $\chi_{c_1,1}^{A_1}, \dots$ seien Schalenmodell-WFen. Das Gesamtsystem aller A Nukleonen ist ein bezüglich aller Nukleonen antisymmetrischer Zustand

$$\phi_c(\underline{\xi}) = a \{ \phi_{c_1}^{A_1}(\underline{\xi}^1) \phi_{c_2}^{A_2}(\underline{\xi}^2) \}$$

a ist der Antisymmetrisierungsoperator, der alle Nukleonen der beiden Cluster permutiert.

Um die PY- und PT-Zustände zu erhalten, werden folgende neue Variable eingeführt:

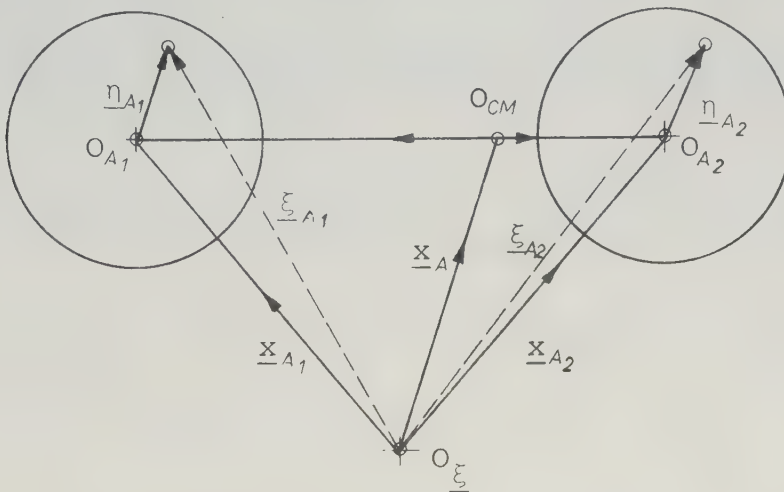


Abb. 1: Koordinaten und Impulse . $\underline{\xi}$: Koordinaten der Nukleonen in den Kernen A_1 und A_2 bzgl. festem KOS $O_{\underline{\xi}}$; $\underline{x}_{A_1}$ und $\underline{x}_{A_2}$: CM-Koordinate von A_1 und A_2 bzgl. $O_{\underline{\xi}}$; $\underline{p}_{A_1}$ und $\underline{p}_{A_2}$: zu $\underline{x}_{A_1}$ und $\underline{x}_{A_2}$ konjugierte Impulse; $\underline{x}$: Relativkoordinate der Schwerpunkte O_{A_1} und O_{A_2} ; $\underline{p}$: zu $\underline{x}$ konjugierter Impuls; $\underline{x}_A$: CM-Koordinate von A_1 und A_2 ; $\underline{p}_A$: zu $\underline{x}_A$ konjugierter Impuls.

$$\underline{x}_{A_1} = \frac{1}{A_1} \sum_{i=1}^{A_1} \underline{\xi}_i, \quad \underline{x}_{A_2} = \frac{1}{A_2} \sum_{j=A_1+1}^A \underline{\xi}_j, \quad \underline{x}_A = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^A \underline{\xi}_i$$

$$\underline{p}_{A_1} = \sum_{i=1}^{A_1} \underline{\pi}_i, \quad \underline{p}_{A_2} = \sum_{j=A_1+1}^A \underline{\pi}_j, \quad \underline{p}_A = \underline{p}_{A_1} + \underline{p}_{A_2}$$

Die $\underline{\pi}_i$ sind die zu den $\underline{\xi}_i$ konjugierten Einteilchenimpulse. Weiter seien

$$\underline{x} = \underline{x}_{A_1} - \underline{x}_{A_2} \quad \text{und} \quad \underline{p} = \frac{1}{A} (A_1 \underline{p}_{A_1} - A_2 \underline{p}_{A_2})$$

der Abstand der Schwerpunkte beider Cluster und $\underline{p}$ der zu $\underline{x}$ konjugierte Impuls.

Im allgemeinen Fall kann man analog zu (2.17) die Lösung der SGL (2.11) als Überlagerung von PT-Zuständen des A-Nukleonensystems ansetzen:

$$\psi(\underline{\xi}) = \sum_C \phi_C^{PT}(\underline{\xi}) \quad (2.18)$$

wo

$$\phi_C^{PT}(\underline{\xi}) = \int d^3\underline{K} \int d^3\underline{R} C_C(\underline{K}, \underline{R}) \mathcal{A} \{ \exp [i\underline{K}(\underline{x} - \underline{R})] \phi_C(\underline{n}, \underline{x} - \underline{R}) \}$$

mit

$$\underline{n} = \{\underline{n}^{A_1}, \underline{n}^{A_2}\}, \quad \underline{n}^{A_1} = \{\underline{n}_i^{A_1}\}, \quad \underline{n}^{A_2} = \{\underline{n}_j^{A_2}\}, \quad i=1, 2 \dots A_1, \quad j=A_1+1, \dots A$$

und

$$\underline{n}_{i,j}^{A_1,2} = \underline{\xi}_{i,j} - \underline{x}_{A_1,2}$$

ist. $\underline{K}$ und $\underline{R}$ spielen die Rolle von $\underline{G}_{\text{Cen}}$ und können außerhalb des

Wechselwirkungsbereichs der Kerne als Erwartungswerte von $\underline{x}$ und $\underline{p}$ interpretiert werden. Die WF $\phi_c(\underline{\eta}, \underline{x} - \underline{R})$ hat die Form

$$\phi_c(\underline{\eta}, \underline{x} - \underline{R}) = \int d^3 \underline{R}_A \phi_{c_1}^{A_1} \left[\underline{\eta}^{A_1} + (\underline{x}_A - \underline{R}_A) + \beta (\underline{x} - \underline{R}) \right] \times \\ \times \phi_{c_2}^{A_2} \left[\underline{\eta}^{A_2} + (\underline{x}_A - \underline{R}_A) - \alpha (\underline{x} - \underline{R}) \right]$$

mit

$$\alpha = \frac{A_1}{A} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{A_2}{A} .$$

Wenn $\phi_c(\underline{\xi})$ faktorisiert, kann man $\psi(\underline{\xi})$ analog zu (2.15) nach PY-Zuständen entwickeln:

$$\psi(\underline{\xi}) = \sum_c \phi_c^{PY}(\underline{\xi}) \quad (2.19)$$

mit

$$\phi_c^{PY}(\underline{\xi}) = \int d^3 \underline{R} c_c(\underline{R}) \mathcal{A} \{ \phi_c(\underline{\eta}, \underline{x} - \underline{R}) \} \\ = \mathcal{A} \{ \int d^3 \underline{R} c_c(\underline{R}) G_c(\underline{x} - \underline{R}) \phi_c^{int}(\underline{\eta}) \}$$

Normalerweise werden die Modell-WFen $\phi_c(\underline{\eta}, \underline{x} - \underline{R})$ aus Zweizentrenschalenmodellzuständen konstruiert. Entsprechen die Einteilchen-WFen Zuständen eines harmonischen Oszillators, so faktorisiert $\phi_c(\underline{\xi})$ dann, wenn die Oszillatorparameter der beiden Cluster gleich sind. Man kann zeigen [PTP 80], daß der GC-Unterraum mit der Entwicklung (2.18) im Gegensatz zu demjenigen mit der Entwicklung (2.19) mit dem Eigenraum der kollektiven Variablen im vollständigen Vielteilchen-HR zusammenfällt.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß man mit dem HW-Ansatz (2.18) bzw. (2.19) versucht, die dynamische Entwicklung des A-Teilchensystems durch die Freiheitsgrade der Relativbewegung zu beschreiben.

2.3.1 Herleitung der HWG aus einem Variationsprinzip

Man kann zeigen [GH 81, HG 81], daß die HWG (2.2) zur Beschreibung komplexer Kernreaktionen dem Kohn'schen Variationsprinzip genügt. Dieses Variationsprinzip besagt, daß eine Test-WF $\psi_t(\underline{\xi})$ dann Lösung der SGI (2.11) ist, wenn die Variation des Funktionals

$$J = \lambda_t + \langle \psi_t | \mathcal{H}_{PP}' - E | \psi_t \rangle_\eta \quad (2.20)$$

verschwindet. Hier bezeichnet die mit η indizierte Klammer die Integration über alle Einteilchenkoordinaten $\underline{\eta}_i^A$. Die Test-WF $\psi_t(\underline{\xi})$ entspricht dem Ansatz (2.18) oder (2.19). λ_t ist ein Parameter, der das asymptotische Verhalten von $\psi_t(\underline{\xi})$ charakterisiert. Er ist i. a. mit der Streuamplitude oder der Streuphase verknüpft.

Setzt man in (2.20) den Ansatz (2.18) ein, so erhält man mit der Bedingung

$$\delta [J] = 0$$

die HWG:

$$\sum_c \int d^3 \underline{K} \int d^3 \underline{R} \left[H_{c',c}(\underline{K}', \underline{R}', \underline{K}, \underline{R}) - E N_{c',c}(\underline{K}', \underline{R}', \underline{K}, \underline{R}) \right] C_c(\underline{K}, \underline{R}) = 0 \quad (2.21)$$

mit

$$\left. \begin{array}{l} H_{c',c}(\underline{K}', \underline{R}', \underline{K}, \underline{R}) \\ N_{c',c}(\underline{K}', \underline{R}', \underline{K}, \underline{R}) \end{array} \right\} = \langle \phi_{c'}(\underline{K}', \underline{R}') | \left\{ \mathcal{H}_{1PP}' \right\} | \phi_c(\underline{K}, \underline{R}) \rangle_\eta$$

und

$$\phi_c(\underline{K}, \underline{R}) = \mathcal{A} \{ \exp [i \underline{K}(\underline{x} - \underline{R})] \phi_c(\underline{\eta}, \underline{x} - \underline{R}) \}$$

Wählt man als Testfunktion $\psi_t(\underline{\xi})$ den Ansatz (2.19), so lautet die resultierende HWG:

$$\sum_c \int d^3 \underline{R} \left[H_{c',c}(\underline{R}', \underline{R}) - E N_{c',c}(\underline{R}', \underline{R}) \right] C_c(\underline{R}) = 0 \quad (2.22)$$

mit

$$\left. \begin{matrix} H_{c',c}(\underline{R}', \underline{R}) \\ N_{c',c}(\underline{R}', \underline{R}) \end{matrix} \right\} = \langle \phi_{c'}(\underline{R}') | \left\{ \begin{matrix} x_{PP} \\ 1 \end{matrix} \right\} | \phi_c(\underline{R}) \rangle_\eta$$

und

$$\phi_c(\underline{R}) = a \{ \phi_c(\underline{\eta}, \underline{x} - \underline{R}) \}$$

Die Gleichungen (2.21) und (2.22) stellen ein gekoppeltes System von IGLen dar, dessen Lösung i.a. mit Schwierigkeiten verbunden ist. Bis heute wurden nur wenige Mehrkanal-Rechnungen angestellt [BHL 78, LBH 80, Ka 78]. Betrachtet man nur einen Streukanal, mit dem man sich auf elastische Streuung beschränken muß, und wählt man Modell-WFen ϕ_c , die faktorisieren, so reduziert sich die Gleichung (2.22) auf die einfachere Form

$$\int d^3 \underline{R} \ c(\underline{R}) \left[H(\underline{R}', \underline{R}) - E N(\underline{R}', \underline{R}) \right] = 0 \quad (2.23)$$

Dies ist eine homogene FIGl 1. Art. De Takacsy [Ta 72] machte als erster einen Vorschlag, wie man (2.23) auf die Form einer inhomogenen IGL bringen kann, indem man das asymptotische Verhalten der Gewichtsfunktion $c(\underline{R})$ berücksichtigt. (2.16) verknüpft nämlich die Streu-WF u_c^{PY} , deren asymptotisches Verhalten bekannt ist, mit der GC-Funktion $c_c(\underline{R}_A)$. (Im folgenden werden die Indizes A und PY weggelassen). Dazu entwickelt man die WF $u(\underline{x})$ und die GC-Funktion $c(\underline{R})$ nach Partialwellen:

$$u(\underline{x}) = \frac{1}{x} \sum_l (2l+1) u_l(x) P_l(\cos\theta)$$

$$c(\underline{R}) = \frac{1}{R} \sum_l (2l+1) c_l(R) P_l(\cos\theta)$$

(2.16) liefert den Zusammenhang

$$u_l(x) = \int R^2 dR \ c_l(R) \ G_l(x, R) \quad (2.24)$$

wo $G_l(x, R)$ die l-te Partialwelle von $G(\underline{x} - \underline{R})$ darstellt.

$K(\underline{R}', \underline{R})$ bezeichne den Kern der HWG (2.23):

$$K(\underline{R}', \underline{R}) = H(\underline{R}', \underline{R}) - E N(\underline{R}', \underline{R})$$

Seine Partialwellenentwicklung lautet:

$$K(\underline{R}', \underline{R}) = \sum_1 K_1(\underline{R}', \underline{R}) P_1\left(\frac{\underline{R}' \underline{R}}{\underline{R}' \underline{R}}\right)$$

Das Kohn'sche Variationsprinzip liefert für jede Partialwelle von $c(\underline{R})$ ein Funktional der Form BB 75

$$\int d\underline{R}' \int d\underline{R} c_1(\underline{R}') K_1(\underline{R}', \underline{R}) c_1(\underline{R}) = 0$$

Könnte man die $c_1(\underline{R})$ frei wählen, so lieferte die Variation dieses Funktional eine HWG vom Typ (2.23) für jede einzelne Partialwelle:

$$\int d\underline{R} K_1(\underline{R}', \underline{R}) c_1(\underline{R}) = 0 \quad (2.25)$$

Doch $c_1(\underline{R})$ ist aufgrund der Beziehung (2.24) durch das asymptotische Verhalten von $u_1(x)$ genauer festgelegt; es gilt nämlich

$$u_1(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} A(\delta_1) \left[F_1(kx) \cos \delta_1 + G_1(kx) \sin \delta_1 \right]$$

wo k die Wellenzahl der Relativbewegung und δ_1 die zugehörige Streuphase ist. Der Term $A(\delta_1)$ ist ein Normierungsfaktor, $F_1(kx)$ und $G_1(kx)$ sind die regulären bzw. irregulären Coulombfunktionen.

Die Lösungen von (2.25) mit dem korrekten asymptotischen Verhalten bestimmen die Streuphase der Relativbewegung eindeutig [BB 75]. Um solche Lösungen zu erhalten, empfiehlt es sich, den Ansatz (2.25) auf folgende Weise zu modifizieren [BB 75, HWW 77]:

$$\psi_1(\underline{\xi}) = \sum_{i=1}^M \phi_1(\underline{\xi}, \underline{R}_i) c_{1i} + \int_{R_0}^{\infty} R^2 dR \phi_1(\underline{\xi}, \underline{R}) c_1^{as}(\underline{R}) \quad (2.26)$$

mit

$$\phi_1(\underline{\xi}, \underline{R}) = \int d\Omega Y_{10}\left(\frac{\underline{R}}{R}\right) \phi(\underline{\xi}, \underline{R})$$

Man wählt die $\phi_1(\underline{\xi}, R_i)$ und $\phi_1(\underline{\xi}, R)$ so, daß sie ähnlich den PY-Zuständen faktorisieren. Die Integrationsgrenze R_0 wählt man normalerweise als Null, es sei denn, der Überlapp zwischen den $\phi_1(\underline{\xi}, R)$ und den $\phi_1(\underline{\xi}, R_i)$ sei beträchtlich [GLO 75].

Der HW-Ansatz (2.26) legt es nahe, die Relativ-WF (2.24) in einen kurzreichweitigen Anteil $u_1^{sr}(x)$ und einen asymptotischen Anteil $u_1^{as}(x)$ aufzuspalten:

$$u_1(x) = u_1^{sr}(x) + u_1^{as}(x)$$

wo

$$\begin{aligned} u_1^{as}(x) &= \int_{R_0}^{\infty} R^2 dR G_1(x, R) c_1^{as}(R) \\ &= B_1 u_r^0(x) + B_2 u_i^0(x) \end{aligned} \quad (2.27)$$

die Relativbewegung der Cluster außerhalb des Wechselwirkungsbereichs der Kerne beschreibt. Die Funktionen $u_r^0(x)$ und $u_i^0(x)$ sind für große x proportional zu den Coulombfunktionen $F_1(kx)$ und $G_1(kx)$. Die Funktion $u_1^{sr}(x)$ ist quadratintegrierbar und kann als endliche Summe der Form

$$u_1^{sr}(x) = \sum_{i=1}^M c_{1i} G_1(x, R_i)$$

geschrieben werden.

Setzt man die Testfunktion (2.26) in das Kohn'sche Variationsfunktional ein, so liefert die Variation nach den c_{1i} die Gleichung

$$\langle \phi_1(R_j) | H_1 - E | \psi_1 \rangle_{\eta} = 0 \quad (2.28)$$

und die Variation nach der Teststreuphase δ_1 die Gleichung

$$\langle \phi_1(R') | H_1 - E | \psi_1 \rangle_{\eta} = 0 \quad (2.29)$$

Der Hamiltonoperator H_1 bezeichnet den Anteil von $\mathcal{H}'_{pp}$, der zur 1-ten Partialwelle von ψ_p in (2.11) gehört. Die Gleichungen (2.28) und (2.29) sind das Ergebnis des Kohn'schen Variationsprinzips und können zusammen als verallgemeinerte HWG betrachtet werden. Sie lauten explizit:

$$\sum_i \left[H_1(R_j, R_i) - E N_1(R_j, R_i) \right] c_1(R_i) + \int dR \left[H_1(R_j, R) - E N_1(R_j, R) \right] \times \\ \times c_1^{as}(R) = 0$$

und

$$\sum_i \left[H_1(R', R_i) - E N_1(R', R_i) \right] c_1(R_i) + \int dR \left[H_1(R', R) - E N_1(R', R) \right] \times \\ \times c_1^{as}(R) = 0$$

mit

$$\left. \begin{matrix} H_1(R_j, R_i) \\ N_1(R_j, R_i) \end{matrix} \right\} = \langle \phi_1(\underline{\xi}, R_j) | \left\{ \begin{matrix} H_1 \\ 1 \end{matrix} \right\} | \phi_1(\underline{\xi}, R_i) \rangle_\eta$$

$$\left. \begin{matrix} H_1(R_j, R) \\ N_1(R_j, R) \end{matrix} \right\} = \langle \phi_1(\underline{\xi}, R_j) | \left\{ \begin{matrix} H_1 \\ 1 \end{matrix} \right\} | \phi_1(\underline{\xi}, R) \rangle_\eta = \left\{ \begin{matrix} H_1^+(R, R_j) \\ N_1^+(R, R_j) \end{matrix} \right.$$

$$\left. \begin{matrix} H_1(R', R) \\ N_1(R', R) \end{matrix} \right\} = \langle \phi_1(\underline{\xi}, R') | \left\{ \begin{matrix} H_1 \\ 1 \end{matrix} \right\} | \phi_1(\underline{\xi}, R) \rangle_\eta$$

Um eine eindeutige Lösung von (2.28) zu erhalten, wählte de Takacsy [Ta 72] anstelle der Nebenbedingung (2.29) die Anschlußbedingung

$$c_{1M} = \rho_1(R_0) + \operatorname{tg} \delta_1 \gamma_1(R_0)$$

wo ρ_1 und γ_1 solche Funktionen sind, die nach der Transformation (2.27) regulären bzw. irregulären Coulombfunktionen entsprechen.

Andere Möglichkeiten sind [FHW 74]:

$$c_{1M} = \rho_1(R_M) + \operatorname{tg} \delta_1 \gamma_1(R_M)$$

und [HWW 77]:

$$u_1^{\text{sr}}(\zeta_0) = 0$$

wo ζ_0 den Abstand der beiden Cluster bezeichnet, bei dem die Wechselwirkung der Kerne vernachlässigbar ist.

Eine grundlegende Schwierigkeit dieses Verfahrens liegt in der korrekten Bestimmung der asymptotischen Gewichtsfunktion $c_1^{\text{as}}(R)$. Daher wurden neue Ansätze für das Hulthén-Kohn'sche Variationsprinzip formuliert, die die Asymptotik von $c_1(R)$ nicht benötigen. Zum einen kann man den engen Zusammenhang von RGM und GCM, der in (2.27) zum Ausdruck kommt, verwenden [CB 77]. Hier wählt man statt einer Anschlußbedingung für die Gewichtsfunktion eine solche für die Relativ-WF $u_1(x)$ der RGM. Zum anderen läßt sich über das Variationsprinzip die HWG im Wechselwirkungsbereich der Kerne lösen, ohne direkte Annahmen über die Asymptotik machen zu müssen [MK 76].

2.3.2 Zeit als GC - Der Zusammenhang von GCM und TDHF

In den vorigen Abschnitten wurde gezeigt, wie man mit der GCM stationäre Streulösungen beschreiben kann. Die TDHF-Methode versucht im Unterschied hierzu, die zeitabhängige SGI

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}'_{\text{pp}} |\psi(t)\rangle \quad (2.30)$$

näherungsweise mit HF-Zuständen $|\phi(t)\rangle$ zu lösen, die der TDHF-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = h(\phi) |\phi(t)\rangle \quad (2.31)$$

mit dem Funktional $h(\phi)$ genügen. Für die Zustände $|\psi(t)\rangle$ und $|\phi(t)\rangle$ kann man z. B. die Anfangsbedingungen

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi(t=0)\rangle = |\phi_0\rangle$$

wählen, die eine Slaterdeterminante des A-Nukleonensystems ist. Die Lösungen von (2.30) und (2.31) besitzen die folgenden Unterschiede [Gi 77]:

- a) Während (2.31) die zeitliche Entwicklung einer Slaterdeterminante beschreibt, sollte $|\psi(t)\rangle$ nicht als Slaterdeterminante darstellbar sein.
- b) Die Lösung $|\psi(t)\rangle$ beschreibt asymptotisch ein zerfließendes Wellenpaket, was für $|\phi(t)\rangle$ nicht der Fall ist.
- c) Entwickelt man für $t \rightarrow \infty$ die Lösung $|\psi(t)\rangle$ nach Streukanälen, so wird die Wahrscheinlichkeit für jeden Kanal konstant. Dieses Verhalten zeigt die TDHF-Lösung $|\phi(t)\rangle$ nicht. Folglich kann $|\phi(t)\rangle$ nur mittlere Streuquerschnitte liefern.

Betrachtet man die Zeit t als GC [Gi 77, GL 78], so läßt sich die TDHF-Lösung mit einer stationären Streu-WF $|\psi_k^{(+)}\rangle$ verknüpfen, die brauchbare ein- und auslaufende Ströme und guten asymptotischen Impuls besitzt. Um dies zu zeigen, projiziert man zunächst $|\phi(t)\rangle$ auf Zustände mit gutem Drehimpuls:

$$|\phi_{1m}(t)\rangle = P_{1m}|\phi(t)\rangle$$

P_{1m} ist der Drehimpulsprojektionsoperator. Dann berechnet man den Energie- und Überlappkern

$$H_{1m}(t', t) = \langle \phi(t') | \mathcal{H}'_{PP} P_{1m} | \phi(t) \rangle$$

und

$$N_{1m}(t', t) = \langle \phi(t') | P_{1m} | \phi(t) \rangle$$

und verwendet sie als Kerne einer HWG mit der GC t und der Gewichtsfunktion $c_{1m}(t)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \left[H_{1m}(t', t) - E N_{1m}(t', t) \right] c_{1m}(t) = 0 \quad (2.32)$$

Die Lösung $c_{1m}(t)$ dieser Gleichung verknüpft die projizierten TDHF-Zustände $|\phi_{1m}(t)\rangle$ mit den Partialwellen von $|\psi_k^{(+)}\rangle$ über den

HW-Ansatz:

$$|\psi_{1m}^k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, c_{1m}(t) |\phi_{1m}(t)\rangle$$

Die Lösungen der HWG (2.32) ermöglichen es also, die physikalisch unrichtigen TDHF-Lösungen $|\phi(t)\rangle$ mit Streu-WFen zu verknüpfen, die korrekte Wirkungsquerschnitte liefern. Bislang wurden keine Anwendungen dieses Verfahrens veröffentlicht.

3. Diskussion der stationären Streutheorie im GC-Formalismus

In den bisherigen Anwendungen der GCM auf physikalische Probleme war die Gewichtsfunktion $c(\alpha)$ stets mit anschaulichen physikalischen Größen verknüpft. Bei der Berechnung gebundener Zustände hing sie mit den Entwicklungskoeffizienten der Lösung der SGI zusammen [siehe z. B. (2.7)] und bei der Beschreibung komplexer Kernreaktionen mit der WF der Relativbewegung der beiden Cluster [siehe z. B. (2.24)]. Im Unterschied dazu hat die GC-Funktion bei der GC-Formulierung der stationären Potentialstreuung keine anschauliche Bedeutung mehr, sondern kann nur noch als rein mathematisches Objekt angesehen werden. Sie ist Lösung einer homogenen FIGl 1. Art und gehört damit zum Nullraum des Kerns der auftretenden HWG. Ein modifizierter HW-Ansatz, wie er in Abschn. 3.2.2 aufgestellt wird, führt auf eine inhomogene FIGl 1. Art, deren Lösung eine absolut integrierbare Funktion ist.

Weiter unterscheiden sich die hier untersuchten Modellprobleme von den bisherigen Anwendungen der GCM dadurch, daß als erzeugende Funktionen Kontinuumszustände gewählt werden. Dies hat zur Folge, daß der Überlappkern $N(\beta, \alpha)$ und der Energiekern $H(\beta, \alpha)$ nicht einzeln definiert sind. Beide sind singuläre Größen, deren Singularitäten sich jedoch im Kern der HWG

$$K(\beta, \alpha) = H(\beta, \alpha) - E N(\beta, \alpha)$$

gegenseitig aufheben. Im folgenden wird die HWG für Potentialstreuung hergeleitet, in der die Modellfunktionen selbst stationäre Streulösungen bilden.

3.1 Die HWG für Potentialstreuung

Gesucht wird eine stationäre Streu-WF $\psi_{\underline{k}}(\underline{r})$, die Lösung der SGI

$$\left[\nabla_{\underline{r}}^2 + k^2 - V(\underline{r}) \right] \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = 0 \quad (3.1)$$

ist. Es gelten die Bezeichnungen

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar} E \quad ; \quad V(\underline{r}) = \frac{2m}{\hbar} U(\underline{r})$$

wo m die Masse und E die Energie des gestreuten Teilchens sind und $U(\underline{r})$ das Streupotential bedeutet. Die Lösung von (3.1) erfülle die Randbedingung einer Überlagerung einer ebenen Welle und auslaufenden Kugelwelle mit der Streuamplitude $F(\Omega)$:

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\underline{k}\underline{r}} + F(\Omega) \frac{e^{i\underline{k}r}}{r} \quad (3.2)$$

Als HW-Ansatz für $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$ wird einer Überlagerung von stationären Streuzuständen gewählt, die einer (3.2) entsprechenden Randbedingung mit den Streuamplituden $f(\underline{\alpha}, \Omega)$ genügen:

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r}) = \int d\underline{\alpha} \, c(\underline{\alpha}) \, \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) \quad (3.3)$$

mit

$$\phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\underline{k}\underline{r}} + f(\underline{\alpha}, \Omega) \frac{e^{i\underline{k}r}}{r}$$

Die Funktionen $\phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$ sind Lösungen der SGL

$$\left[\nabla_{\underline{r}}^2 + k^2 - v(\underline{\alpha}, \underline{r}) \right] \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) = 0 \quad (3.4)$$

und von der GC $\underline{\alpha}$ abhängig. $v(\underline{\alpha}, \underline{r})$ ist ein bestimmt gewähltes Modellpotential.

Setzt man den HW-Ansatz (3.3) in die SGL (3.1) ein, multipliziert anschließend von links mit $\phi_{\underline{k}}^{(+)*}(\underline{\beta}, \underline{r})$ und integriert über den Raum der Koordinate $\underline{r}$, so erhält man den Ausdruck:

$$\int d\underline{\alpha} \int d^3\underline{r} \, \phi_{\underline{k}}^{(+)*}(\underline{\beta}, \underline{r}) \left[\nabla_{\underline{r}}^2 + k^2 - v(\underline{r}) \right] \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) \, c(\underline{\alpha}) = 0$$

Berücksichtigung von (3.4) liefert die HWG für Potentialstreuung

$$\int d\underline{\alpha} \, \left\{ \int d^3\underline{r} \, \phi_{\underline{k}}^{(+)*}(\underline{\beta}, \underline{r}) \left[v(\underline{\alpha}, \underline{r}) - v(\underline{r}) \right] \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) \right\} c(\underline{\alpha}) = 0$$

$$\text{bzw.} \quad \int d\underline{\alpha} \, K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) \, c(\underline{\alpha}) = 0 \quad (3.5)$$

mit dem Kern

$$K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) = \int d^3 \underline{r} \phi_{\underline{k}}^{(+)*}(\underline{\beta}, \underline{r}) [v(\underline{\alpha}, \underline{r}) - v(\underline{r})] \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r})$$

Dieser Kern ist wegen des Auftretens von $v(\underline{\alpha}, \underline{r})$ nicht hermitisch; es gilt

$$K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) - K^*(\underline{\alpha}, \underline{\beta}) = \int d^3 \underline{r} \phi_{\underline{k}}^{(+)*}(\underline{\beta}, \underline{r}) [v(\underline{\alpha}, \underline{r}) - v(\underline{\beta}, \underline{r})] \phi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) \quad (3.6)$$

Außerdem ist er wegen des asymptotischen Verhaltens der erzeugenden Funktionen nicht quadratintegrabel, wie anhand der untersuchten Beispiele gezeigt wird.

Die Lösung $c(\underline{\alpha})$ der HWG (3.5) muß der Nebenbedingung

$$\int d\underline{\alpha} c(\underline{\alpha}) = 1 \quad (3.7)$$

genügen, die aus der asymptotischen Form des HW-Ansatzes (3.3) folgt:

$$e^{i\underline{k}\underline{r}} + F(\Omega) \frac{e^{i\underline{k}\underline{r}}}{r} = \int d\underline{\alpha} c(\underline{\alpha}) \left[e^{i\underline{k}\underline{r}} + f(\underline{\alpha}, \Omega) \frac{e^{i\underline{k}\underline{r}}}{r} \right]$$

Dieser Ausdruck liefert außerdem eine GC-Darstellung für die Streuamplitude $F(\Omega)$:

$$F(\Omega) = \int d\underline{\alpha} c(\underline{\alpha}) f(\underline{\alpha}, \Omega) \quad (3.8)$$

Wie zu erwarten, verhält sich die Streuamplitude $F(\Omega)$ analog zur WF $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$.

3.1.1 Entwicklung nach Partialwellen

Ist das Streupotential $V(\underline{r})$ ein Zentralpotential, so lassen sich die obigen Gleichungen zweckmäßigerweise durch Partialwellenanalyse auf die Berechnung der Radial-WFen $R_1(k, r)$ reduzieren. Dazu verwendet man die üblichen Entwicklungen

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r}) = \sum_l \frac{2l+1}{kr} i^l R_l(k, r) P_l(\cos\theta)$$

und

$$\phi_k^{(+)}(\underline{\alpha}, \underline{r}) = \sum_l \frac{2l+1}{kr} i^l X_l(\underline{\alpha}, k, r) P_l(\cos\theta)$$

Mit dem gebräuchlichen Ansatz

$$u_l(k, r) = r R_l(k, r)$$

und

$$\chi_l(\underline{\alpha}, k, r) = r X_l(\underline{\alpha}, k, r)$$

erhält man aus (3.1) und (3.4) die Differentialgleichungen (DGlen):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - v(r) \right] u_l(k, r) = 0 \quad (3.9)$$

und

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - v(\underline{\alpha}, r) \right] \chi_l(\underline{\alpha}, k, r) = 0 \quad (3.10)$$

mit den bekannten Randbedingungen für $u_l(k, r)$ und $\chi_l(\underline{\alpha}, k, r)$. Die Streuamplituden der einzelnen Partialwellen $F_l(\Omega)$ und $f_l(\underline{\alpha}, \Omega)$ sind die Ausdrücke

$$F_l(\Omega) = \frac{2l+1}{k} e^{i\eta_l} \sin\eta_l$$

und

$$f_l(\underline{\alpha}, \Omega) = \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l(\underline{\alpha})} \sin\delta_l(\underline{\alpha}) ,$$

wo η_l die Streuphase ist, die zu $u_l(k, r)$ gehört, und $\delta_l(\underline{\alpha})$ diejenige von $\chi_l(\underline{\alpha}, k, r)$ ist.

Statt dieser komplexen WFn, die auslaufende Wellen beschreiben, kann man reelle WFn wählen, die stehende Wellen repräsentieren und über die K-Matrix definiert sind. Diese stehenden Wellen erfüllen die asymptotischen Randbedingungen

$$u_1(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{j}_1(kr) - \operatorname{tg} \eta_1 \hat{n}_1(kr)$$

und

$$\chi_1(\underline{\alpha}, k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{j}_1(kr) - \operatorname{tg} \varphi_1(\underline{\alpha}) \hat{n}_1(kr)$$

$j_1(kr)$ und $n_1(kr)$ sind die sphärischen Bessel- und Neumann-funktionen [Jo 79] und

$$\hat{j}_1(kr) = r j_1(kr) \quad , \quad \hat{n}_1(kr) = r n_1(kr)$$

Dem HW-Ansatz (3.3) entspricht der Ansatz

$$u_1(k, r) = \int d\underline{\alpha} c_1(\underline{\alpha}) \chi_1(\underline{\alpha}, k, r) \quad (3.11)$$

für jede einzelne Partialwelle. Die entsprechende HWG lautet

$$\int d\underline{\alpha} K_1(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) c_1(\underline{\alpha}) = 0 \quad (3.12)$$

mit dem Kern

$$K_1(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) = \int_0^\infty dr \chi_1(\underline{\beta}, k, r) [v(\underline{\alpha}, r) - v(r)] \chi_1(\underline{\alpha}, k, r) \quad (3.13)$$

(3.12) ist mit der Nebenbedingung

$$\int d\underline{\alpha} c_1(\underline{\alpha}) = 1 \quad (3.14)$$

zu lösen, die wie (3.7) aus der asymptotischen Form des HW-Ansatzes (3.11) folgt. Dieser liefert ähnlich der Beziehung (3.8) eine Darstellung der Streuphase, nämlich

$$\operatorname{tg} \eta_1 = \int d\underline{\alpha} c_1(\underline{\alpha}) \operatorname{tg} \varphi_1(\underline{\alpha}) \quad (3.15)$$

Man erkennt hieraus, daß man für jede einzelne Partialwelle $u_1(k, r)$ eine HWG der Form (3.12) mit der Nebenbedingung (3.14) lösen muß, um die Streu-WF $\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{r})$ oder deren Streuamplitude $F(\Omega)$ zu berechnen. Im folgenden werden die Indizes 1 und k weglassen.

Zur Behandlung der untersuchten Zentralpotentiale $V(r)$ wurden als Modellpotentiale kugelsymmetrische Potentialtöpfe oder -barrieren gewählt, deren Breite R als GC diente. Die GC R ist auf einem Intervall $\Omega \subseteq [0, \infty]$ definiert.

Die Modellpotentiale sind also von der Form

$$v(\underline{a}, r) = \begin{cases} v(R, r) = v_0 & r < R \\ v(R, r) = 0 & r > R \end{cases}$$

Die SGI ist für diese Modellpotentiale direkt lösbar, sodaß die zugehörigen erzeugenden Funktionen analytisch gegeben sind [siehe Abschn. 3.1.2] .

Die auftretenden Integralkerne $K(R', R)$ sind nicht quadratintegrabel, aber i. a. stetige¹ Funktionen von R' und R mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{R' \rightarrow 0 \\ R \rightarrow 0}} K(R', R) &= \lim_{\substack{R' \rightarrow 0 \\ R \rightarrow \infty}} K(R', R) = \lim_{\substack{R' \rightarrow \infty \\ R \rightarrow 0}} K(R', R) = \\ &= \lim_{\substack{R' \rightarrow \infty \\ R \rightarrow \infty}} K(R', R) = - \frac{\lambda_{BN}}{k} \end{aligned}$$

wo λ_{BN} die Born'sche Näherung für die Streuphase der Funktion $u(r)$ ist:

$$\lambda_{BN} = \text{tg} \eta_{BN} = -k \int_0^{\infty} dr \, \hat{j}(kr) V(r) \hat{j}(kr)$$

¹ Es treten auch solche Kerne auf, die nicht stetig in R' und R sind, sondern endliche Sprungstellen aufweisen. Die weitere Diskussion wird dadurch nicht entscheidend beeinflusst. Daher erwähne ich solche Unstetigkeiten nur dann, wenn sie für die Diskussion von Bedeutung sind; ansonsten nenne ich die entsprechenden Funktionen stetig.

3.1.2 Untersuchte Modellprobleme

In dieser Arbeit werden die folgenden Potentiale $U(r)$ gewählt:

a) das anziehende Exp-Potential $U(r) = -U_0 e^{-ar}$, $U_0 > 0$

b) das abstoßende Exp-Potential $U(r) = U_0 e^{-ar}$, $U_0 > 0$

c) das Morsepotential, das einen attraktiven und einen repulsiven Bereich besitzt:

$$U(r) = U_0 \left[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)} \right], U_0 > 0$$

d) ein kugelsymmetrischer Potentialtopf mit vorgegebener Breite und Tiefe.

3.1.2.1 s-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential

Die elastische Proton- Neutron-Streuung wird sowohl im Singulett- als auch im Triplettzustand in brauchbarer Näherung durch ein anziehendes Exp-Potential beschrieben [Hu 57]. In den durchgeführten Rechnungen wurden die Parameter des Singulettzustandes gewählt:

$$U_0 = 216.8 \text{ MeV} \quad \longrightarrow \quad V_0 = 5.2283 \text{ fm}^{-2}$$

$$a = 1.5925 \text{ fm}^{-1}$$

Als Modellpotentiale dienten

$$\text{VS1 (Abb. 2)} \quad v(R,r) = \begin{cases} v_0 = -V_0 e^{-aR} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

$$\text{VS2 (Abb. 3)} \quad v(R,r) = \begin{cases} v_0 = -\frac{6V_0}{a^3 R^3} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

$$\text{VS3} \quad v(R,r) = \begin{cases} v_0 = -.8549 & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Im Potential VS2 ist die radiale Fläche jedes Topfes identisch mit der radialen Fläche des Exp-Potentials, d. h.

$$\int_0^R r^2 dr v_0 = \int_0^\infty r^2 dr V(r)$$

Die Tiefe des Modellpotentialtopfes in VS3 ist so gewählt, daß dieser Topf mit der Breite $R_0 = 2.1$ fm die Streuphase des Exp-Potentials bei $k = .25$ besitzt. Der Zusammenhang von Potentialtopftiefe v_0 und -breite R für VS1 und VS2 sind in Abb. 2 u. 3 dargestellt.

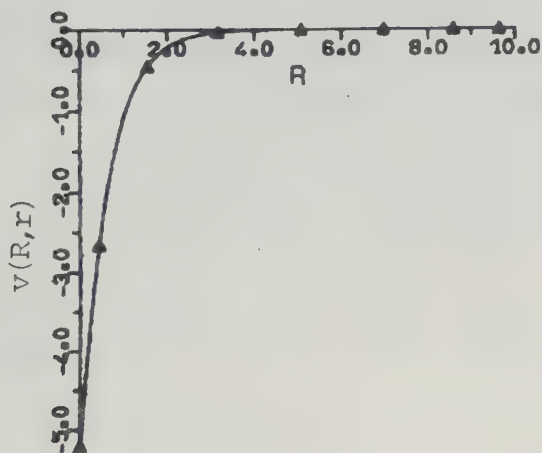


Abb. 2: Potentialtopftiefe in Abhängigkeit von der Breite bei VS1

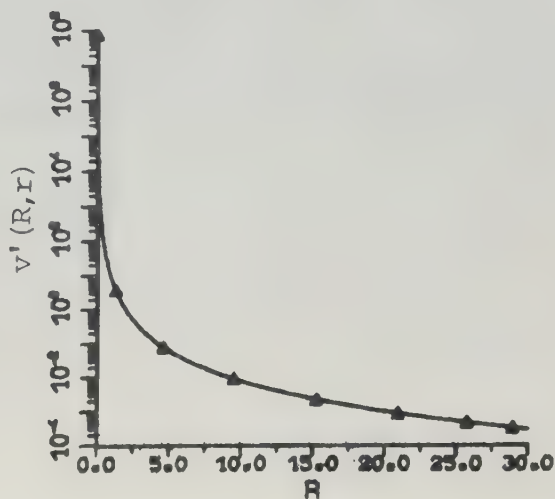


Abb. 3: Potentialtopftiefe in Abhängigkeit von der Breite bei VS2
($v'(R,r) = -v(R,r)$)

Die erzeugenden Funktionen erfüllen die SG1 (3.10)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - v(R,r) \right] \chi_0(R,r) = 0$$

und lauten

$$\chi_0(R, r) = \begin{cases} A_0(R) \hat{j}_0(k_0 r) & r < R \\ \hat{j}_0(kr) - \operatorname{tg} \delta_0(R) \hat{n}_0(kr) & r > R \end{cases}$$

wo $A_0(R)$ so gewählt ist, daß $\chi_0(R, r)$ die Anschlußbedingung bei $r = R$ erfüllt:

$$A_0(R) = \frac{\hat{j}_0(kR) - \operatorname{tg} \delta_0(R) \hat{n}_0(kR)}{\hat{j}_0(k_0 R)}$$

und $k_0 = [k^2 - v_0]^{1/2}$ ist.

Die Streuphase $\delta_0(R)$ hat die Form

$$\delta_0(R) = -kR + \operatorname{arctg} \left[\frac{k}{k_0} \operatorname{tg}(k_0 R) \right]$$

Die SGI (3.9) hat für das Exp-Potential eine analytische Lösung, die durch die Jostfunktion $\mathcal{F}_0(k)$

$$\mathcal{F}_0(k) = \exp\{v \ln y\} \Gamma(1 - 2v) J_{-2v}(2\sqrt{y})$$

und die Jost-Lösung $f(k, r)$

$$f(k, r) = e^{ikr} \exp \{ - 2i\sqrt{y} e^{-z} \} F(.5 - 2v, 1 - 4v, 4i\sqrt{y} e^{-z})$$

mit

$$v = \frac{ik}{a}, \quad y = \frac{v_0}{a^2}, \quad z = \frac{ar}{2}$$

darstellbar ist [Ne 66, S. 420]. $\Gamma(\mu)$ ist die Gammafunktion, $J_\nu(\mu)$ die Besselfunktion und $F(a, b, c)$ die konfluente hypergeometrische Funktion. Die Lösung $u_0(r)$ von (3.11) lautet

$$u_o(r) = \frac{e^{-i\eta_o}}{\cos\eta_o} \frac{\phi(k,r)}{\mathcal{F}_o(k)}$$

mit

$$\phi(k,r) = \frac{i}{2} \left[\mathcal{F}_o(k) f^*(k,r) - \mathcal{F}_o(-k) f(k,r) \right]$$

Für die Streuphase folgt:

$$\eta_o = \frac{1}{2} \arg \left[\frac{\mathcal{F}_o(-k)}{\mathcal{F}_o(k)} \right] = \frac{1}{2} \arg \left[\frac{F(.5 + 2v, 1 + 4v, 4i\sqrt{y})}{F(.5 - 2v, 1 - 4v, 4i\sqrt{y})} \right]$$

3.1.2.2 p-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential

Im Unterschied zur s-Wellen-Streuung am Exp-Potential existiert für die p-Wellen keine analytische Lösung. Die berechneten Streuphasen sind nur mit Näherungswerten aus der Literatur vergleichbar und daher nicht so sicher zu beurteilen.

Im Gegensatz zur s-Wellen-Streuung ist das effektive Potential $V_{\text{eff}}(r)$ für die p-Wellen rein repulsiv und am Ursprung singular (Abb. 4):

$$V_{\text{eff}}(r) = -V_o e^{-ar} + \frac{2}{r^2}$$

Die numerischen Rechnungen ergaben bei der Lösung der HWG (3.12) im Vergleich mit den s-Wellen erheblich größere Probleme, die auf das Vorhandensein des Drehimpulsterms zurückzuführen sind. Während die Streuphase η_o nur in groben Grenzen vom Lösungsverfahren der HWG und dem gewählten Definitionsbereich der GC R abhängt, reagiert die Streuphase η_1 der

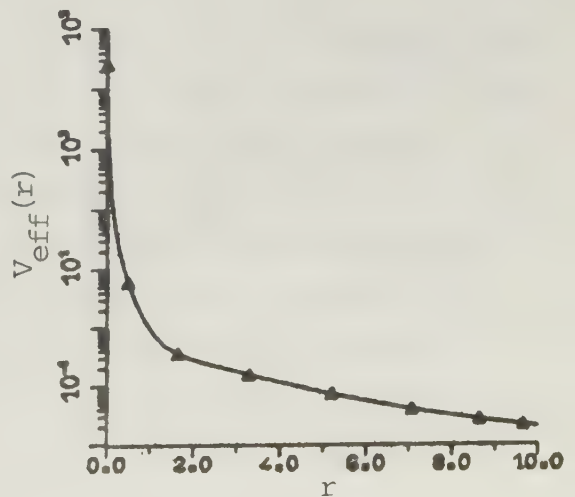


Abb. 4: Effektives Potential für p-Wellen-Streuung am Exp-Potential

p-Wellen darauf sensibler und zeigt ein eher instabiles Verhalten.

Die Modellpotentiale entsprachen den Potentialen VS1 und VS2, während die Testfunktionen $\chi_1(R, r)$ Lösungen der p-Wellen-Streuung am Potentialtopf sind

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - v(R, r) - \frac{2}{r^2} \right] \chi_1(R, r) = 0$$

und die Form

$$\chi_1(R, r) = \begin{cases} A_1(R) \hat{j}_1(k_0 R) & r < R \\ \hat{j}_1(kr) - \operatorname{tg} \delta_1(R) \hat{n}_1(kr) & r > R \end{cases}$$

besitzen mit [Si 71]

$$A_1(R) = \frac{\hat{j}_1(kR) - \operatorname{tg} \delta_1(R) \hat{n}_1(kR)}{\hat{j}_1(k_0 R)}$$

und

$$\operatorname{tg} \delta_1(R) = \frac{\hat{j}_1'(kR) - D \hat{j}_1(kR)}{\hat{n}_1'(kR) - D \hat{n}_1(kR)}, \quad D = \frac{k_0}{k} \frac{\hat{j}_1'(k_0 R)}{\hat{j}_1(k_0 R)}$$

Der Strich ' an den Funktionen $\hat{j}_1$ und $\hat{n}_1$ bezeichnet die Ableitung der Funktionen nach ihrem Argument.

Es ist ein offensichtlicher Nachteil der GCM, daß man zur Lösung der SGI (3.1) $\psi_k^{(+)}(\underline{r})$ eine große Anzahl von Kernen $K_1(R', R)$ entsprechend (3.13) berechnen und deren IGLen lösen muß.

Es ist jedoch nicht möglich, dieses Problem auf einfache Weise zu umgehen. Wählt man z. B. als Basis des HW-Ansatzes (3.11) zur Beschreibung einer l-Welle Modellfunktionen $\chi_{l-1}(R, r)$ der (l-1)-Wellen-Streuung

$$u_l(r) = \int dR c_l(R) \chi_{l-1}(R, r)$$

so erhält man eine resultierende HWG mit dem Kern

$$\bar{K}_1(R'R) = \int dr \chi_{1-1}(R',r) \left[v(R,r) - V(r) - \frac{21}{r^2} \right] \chi_{1-1}(R,r)$$

Für den speziellen Fall mit $l = 1$ lieferte die HWG keine brauchbaren Ergebnisse. Der Grund dafür ist, daß bereits der obige HW-Ansatz fehlerhaft ist. Die allgemeine Lösung von (3.9) ist nämlich eine Linearkombination der regulären und irregulären Lösung jeder Partialwelle [Jo 79, S. 70]:

$$u_1(r) = C_1 r^{1+1} \left\{ \sum_{i=0}^{\infty} c_{1i} r^i \right\} + D_1 r^{-1} \left\{ \sum_{i=0}^{\infty} d_{1i} r^i \right\}$$

Die einzelnen Potenzen von r sind linear unabhängig, sodaß die Funktionen $u_{1'}(r)$ nicht durch Funktionen $\chi_1(R,r)$ für $1' > 1$ darzustellen sind, weil in den $\chi_1(R,r)$ die Potenz $r^{-1'}$ nicht enthalten ist. Dieser HW-Ansatz ist ein Beispiel für die oben erwähnte Tatsache, daß eine FIGl 1. Art nur dann eine Lösung besitzt, wenn die rechte Seite zum Wertebereich des Kerns gehört. Die Funktion $u_{1'}(r)$ gehört offenbar nicht zum Wertebereich des Kerns $\chi_1(R,r)$.

3.1.2.3 s-Wellen-Streuung am abstoßenden Exp-Potential

Das abstoßende Exp-Potential spielt eine große Rolle in der Theorie der Molekülstreuung, insbesondere bei kollinearen Stößen eines Atoms A mit einem Molekül B-C, das als harmonischer oder anharmonischer Oszillator aufgefaßt wird. Die "distorted-wave"-Näherung (DWA) [Ch 74] ist ein gebräuchliches Verfahren zur Beschreibung derartiger Molekülstreuungsprobleme, deren kurzreichweitige Wechselwirkung von einem abstoßenden Exp-Potential gut wiedergegeben wird. Die DWA führt schließlich auf eine SGl vom Typ (3.9), die die Schwingungsrelaxation des Moleküls B-C bestimmt.

Weitere Anwendung findet dieses Potential bei der Beschreibung

der kurzreichweitigen Wechselwirkung zwischen Edelgasatomen, der Wechselwirkung zwischen Gasen und Festkörperoberflächen und der Wechselwirkung von Kristallatomen untereinander [To 72]. Hier kennt man es meist unter dem Namen Born-Mayer-Potential.

Als Modellpotentiale des HW-Ansatzes dienten kugelsymmetrische Potentialbarrieren der Form

$$\text{VB1 (Abb. 5)} \quad v(R, r) = \begin{cases} v_o = V_o e^{-aR} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

$$\text{VB2} \quad v(R, r) = \begin{cases} v_o = \frac{6V_o}{a^3 R^3} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

$$\text{VB3 (Abb. 6)} \quad v(R, r) = \begin{cases} v_o = \frac{V_o}{aR} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

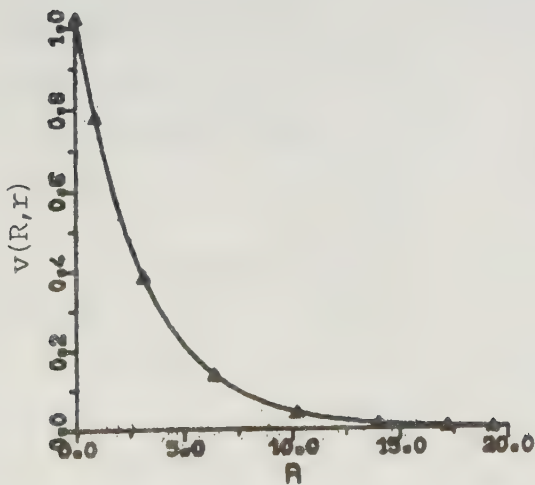


Abb. 5: Potentialhöhe in Abhängigkeit von der Breite bei VB1

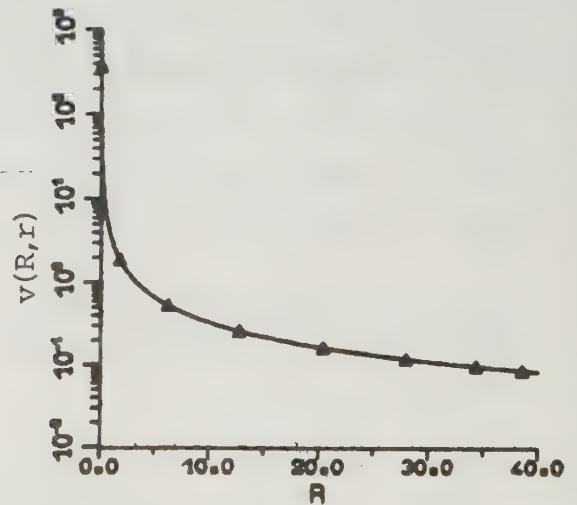


Abb. 6: Potentialhöhe in Abhängigkeit von der Breite bei VB3

VB1 und VB2 sind mit den Modellpotentialen des attraktiven Exp-Potentials bis auf das Vorzeichen identisch. Das Modell-

potential VB3 wurde zusätzlich gewählt, weil das Potential VB2 sich als ungünstig erwies. Es ist zwar möglich, mit VB2 die richtigen Streuphasen des Exp-Potentials zu berechnen, jedoch führt die starke Singularität bei $R = 0$ zu numerischen Problemen. Das Potential VB3 folgt aus der Beziehung

$$\int_0^R dr v_0 = \int_0^\infty dr V(r)$$

Die einfache hyperbolische Singularität dieses Potentials bei $R = 0$ machte sich nicht nachteilig bemerkbar.

Für die Parameter a und V_0 wurden diejenigen für die Streuung von He-Atomen an Wasserstoffmolekülen im Schwingungsgrundzustand [SJ 66] gewählt:

$$a = .315 \quad \text{und} \quad V_0 = 1.025$$

Die erzeugenden Funktionen sind

$$\chi_B(R, r) = \begin{cases} \zeta_{in}(R, r) \\ \zeta_{out}(R, r) \end{cases}$$

mit

$$\zeta_{in}(R, r) = \begin{cases} \frac{C_1(R) \sinh \kappa r}{\kappa} & \text{für } k^2 < v_0 \\ \frac{C_2(R) \sin k_0 r}{k_0} & \text{für } k^2 > v_0 \end{cases} \quad r < R$$

$$\zeta_{out}(R, r) = \begin{cases} \hat{j}_0(\kappa r) - \operatorname{tg} \delta_1(R) \hat{n}_0(\kappa r) & \text{für } k^2 < v_0 \\ \hat{j}_0(kr) - \operatorname{tg} \delta_2(R) \hat{n}_0(kr) & \text{für } k^2 > v_0 \end{cases} \quad r > R$$

und

$$\kappa = [v_0 - k^2]^{1/2}, \quad \delta_1(R) = -\kappa R + \operatorname{arctg} \left[\frac{k}{\kappa} \tanh \kappa R \right]$$

$$C_1(R) = \frac{\kappa \sin \kappa R + \operatorname{tg} \delta_1(R) \cos \kappa R}{k \sinh \kappa R}$$

und

$$k_o = [k^2 - v_o]^{1/2}, \quad \delta_2(R) = -kR + \operatorname{arctg} \left[\frac{k}{k_o} \operatorname{tg}(k_o R) \right]$$

$$C_2(R) = \frac{k_o [\sin kR + \operatorname{tg} \delta_2(R) \cos kR]}{k \sin k_o R}$$

Die nach (3.15) berechneten Streuphasen η_B konnten mit analytischen Ergebnissen verglichen werden, die lauten:

$$\eta_B = \frac{1}{2} \arg \left[\frac{F(.5 + 2v, 1 + 4v, 4\sqrt{y})}{F(.5 - 2v, 1 - 4v, 4\sqrt{y})} \right]$$

mit

$$v = \frac{ik}{a}, \quad y = \frac{v_o}{2}$$

Um für das repulsive Exp-Potential brauchbare numerische Ergebnisse zu erzielen, mußte ein wesentlich höherer Aufwand getrieben werden als beim attraktiven Exp-Potential. Die Güte der berechneten Streuphase hing drastischer vom Definitionsbereich der GC R und der Anzahl der Stützstellen der Quadraturformel ab. Insbesondere zeigte sich, daß das Modellpotential bei Energien mit $k^2 > v_o$ den Wert v_o nicht überschreiten sollte, damit sich die exakte Streuphase reproduzieren läßt. Im Energiebereich $k^2 < v_o$ wurde die Lösung vom Modellpotential nicht so sehr beeinflusst. Der Unterschied zwischen dem anziehenden und abstoßenden Exp-Potential liegt wohl darin begründet, daß die Lösungsfunktion $u_o(r)$ eine im wesentlichen oszillierende Funktion beschreibt, für die die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen eine brauchbare Basis sind. Dagegen verhält sich die Lösung $u_B(r)$ des repulsiven Exp-Potentials zwischen Ursprung und klassischem Umkehrpunkt r_c exponentiell und geht für $r > r_c$ in eine oszillierende Funktion über. Der HW-Ansatz muß in diesem Fall außer der durch den Einfluß des Potentials gestörten freien

stehenden Wellen noch den richtigen exponentiellen Abfall der Funktion $u_B(r)$ im klassisch verbotenen Bereich beschreiben. Als Folge davon war es nicht mehr möglich, als GC-Funktion $c(R)$ eine Funktion mit deutlichem Maximum zu bekommen. Mit anderen Worten: Die Lösung der zugehörigen HWG war numerisch instabiler. Die Tatsache, daß für $k^2 > V_0$ die Modellpotentiale die Höhe V_0 nicht überschreiten sollten, läßt sich damit erklären, daß in diesem Fall die Lösung $u_B(r)$ eine gestörte oszillierende Funktion ist ähnlich derjenigen beim attraktiven Exp-Potential. Modellpotentiale mit $V_0 > V_0$ beschreiben die Abstoßung inkorrekt, insbesondere wenn $V_0 > k^2$ ist. Hier enthält der HW-Ansatz exponentiell abklingende Basisfunktionen, die mit dem Verhalten der Lösung $u_B(r)$ unvereinbar sind.

Man könnte vermuten, daß die auftretenden Schwierigkeiten mit der Wahl der Parameter a und V_0 zusammenhängen. Schließlich sind der Maximalwert V_0 und das Maß des exponentiellen Abfalls a beim anziehenden Potential um den Faktor 5 größer als beim abstoßenden. Jedoch treten die Lösungsschwierigkeiten ebenso für ein Potential mit den Parametern $a = 1.5925$ und $V_0 = 5.2283$ auf.

Auch beim Morsepotential, das einen kurzreichweitigen repulsiven und einen längerreichweitigen attraktiven Anteil besitzt, zeigten sich ähnliche Schwierigkeiten wie beim abstoßenden Exp-Potential. Faßt man die Erfahrungen mit den p-Wellen am anziehenden Exp-Potential, das ein rein abstoßendes effektives Potential besitzt, und der s-Wellen-Streuung am repulsiven Exp-Potential und Morsepotential zusammen, so lassen sich die Probleme auf den abstoßenden Charakter dieser Potentiale zurückführen. In allen drei Fällen muß der HW-Ansatz eine WF $u(r)$ beschreiben, die sich aus zwei verschiedenen Anteilen zusammensetzt; einem exponentiellen Anteil im klassisch verbotenen Bereich und einem im wesentlichen oszillierenden Anteil im klassisch erlaubten Bereich.

3.1.2.4 s-Wellen-Streuung am Morsepotential

Bei der Untersuchung von Molekülstreu Problemen der Form A-B + C oder A-B + C-D kann man mit einem Morsepotential der Form

$$V(r) = V_0 \left[e^{-2a(r - r_0)} - 2e^{-a(r - r_0)} \right]$$

außer der kurzreichweitigen Abstoßung noch die längerreichweitige Anziehung der Moleküle berücksichtigen. Diese ist vor allem bei der Beschreibung von Rotationsanregungen von Bedeutung [Ta 65]. Die Parameter V_0 , a , r_0 in $V(r)$ wurden willkürlich als

$$V_0 = .1 \quad , \quad a = 1. \quad \text{und} \quad r_0 = 3.$$

gewählt.

Die Modellpotentiale sind

$$\text{VM1 (Abb. 7)} \quad v(R,r) = \begin{cases} v_0 = V_0 \left[e^{-2a(R - r_0)} - 2e^{-a(R - r_0)} \right] & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

$$\text{VM2 (Abb. 8)} \quad v(R,r) = \begin{cases} v_0 = V_0 \left[.75e^{2ar_0} - 12.e^{ar_0} \right] / a^3 R^3 & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

und

$$\text{VM3 (Abb. 9)} \quad v(R,r) = \begin{cases} v_0 = V_0 \left[.5e^{2ar_0} - 2.e^{ar_0} \right] / aR & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Das Modellpotential VM2 folgt aus der Relation

$$\int_0^R r^2 dr v_0 = \int_0^\infty r^2 dr V(r)$$

Das Modellpotential VM3 erwies sich speziell bei mittleren Ener-

gien als sehr nützlich. Es folgt aus der Beziehung

$$\int_0^R dr v_0 = \int_0^\infty dr V(r)$$

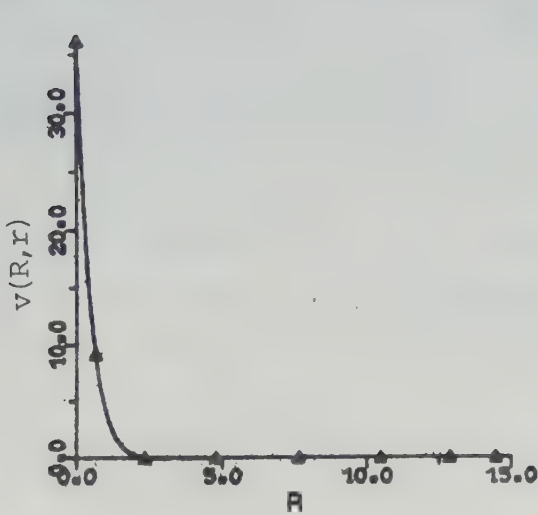


Abb. 7: Potentialhöhe (-tiefe) in Abhängigkeit von der Breite bei VM1

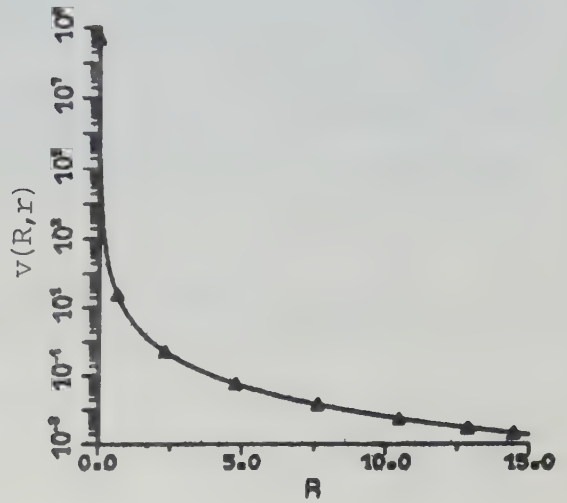


Abb. 8: Potentialhöhe in Abhängigkeit von der Breite bei VM2

Die erzeugenden Funktionen lauten für

$$r < \tilde{r} = r_0 - \frac{\ln 2}{a}$$

($\tilde{r}$ ist die Nullstelle des Morsepotentials)

$$\chi_M(R,r) = \begin{cases} \zeta_{in}(R,r) \\ \zeta_{out}(R,r) \end{cases}$$

wo $\zeta_{in}(R,r)$ und $\zeta_{out}(R,r)$ in

3.1.2.3 definiert sind.

Für $r > \tilde{r}$ heißen sie

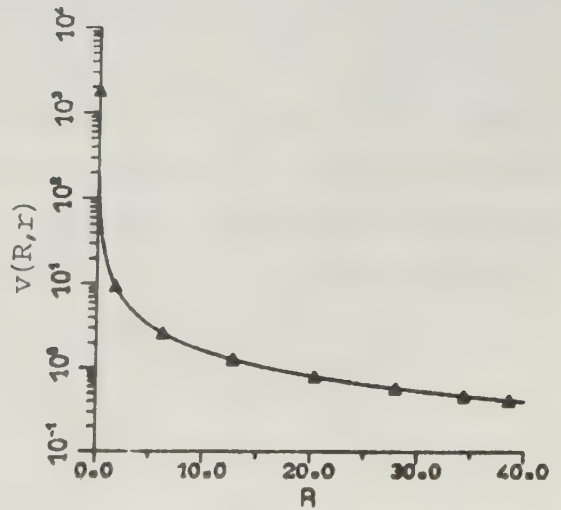


Abb. 9: Potentialhöhe in Abhängigkeit von der Breite bei VM3

$$\chi_M(R, r) = \begin{cases} \frac{C_2(R) \sin k_0 r}{k_0} & r < R \\ \hat{j}_0(kr) - \tan \delta_2(R) \hat{n}_0(kr) & r > R \end{cases}$$

Die Größen k_0 , $C_2(R)$ und $\delta_2(R)$ sind in Abschn. 3.1.2.3 erklärt.

Die Streuphase am Morsepotential ist analytisch gegeben als

$$\eta_M = \frac{1}{2} \arg \left[\frac{F(.5 - \sqrt{y} + v, 1 + 2v, 2\sqrt{y} z)}{F(.5 - \sqrt{y} - v, 1 - 2v, 2\sqrt{y} z)} \right]$$

mit

$$v = \frac{ik}{a}, \quad y = \frac{V_0}{2}, \quad z = e^{-ar_0}$$

Die Behandlung des Morsepotentials warf die meisten Schwierigkeiten auf. Das läßt sich damit erklären, daß es außer dem klassisch verbotenen und abstoßenden Bereich des repulsiven Exp-Potential noch eine Potentialmulde für $r > \tilde{r}$ besitzt. Daher setzt sich die gesuchte Streu-WF $u_M(r)$ des Morsepotentials aus einem exponentiell abfallenden Anteil im klassisch verbotenen Bereich, einem Anteil, der die Abstoßung zwischen dem klassischen Umkehrpunkt und $\tilde{r}$ beschreibt, einem Anteil für den Einfluß der Potentialmulde und der asymptotischen Lösung zusammen.

Die Schwierigkeiten bei der Lösung der HWG hängen wohl auch damit zusammen, daß die Potentialtöpfe des Modellpotentials VM1 am Ursprung anfangen, während die Potentialmulde von $V(r)$ um $\tilde{r}$ nach rechts verschoben ist. Es ist möglich, daß die Wahl von Potentialtöpfen innerhalb der Potentialmulde besser geeignete erzeugende Funktionen liefert. Dies bedingte jedoch kompliziertere Modellfunktionen.

Ein interessantes Ergebnis liefert das Modellpotential VM2. Denn es setzt sich ausschließlich aus Potentialbarrieren zusammen, da der Ausdruck

$$\left\{ .75 e^{2ar_o} - 12.e^{ar_o} \right\} > 0$$

ist. Obwohl dieses Modellpotential keine attraktiven Anteile besitzt, erhält man recht brauchbare Lösungen der HWG. Dies deutet darauf hin, daß das Modellpotential nicht unbedingt auf anschauliche Weise an das zu untersuchende Potential angepaßt sein muß, damit die Basis $\chi(R,r)$ ausreichend ist.

3.2 Mathematische Betrachtungen

Die untersuchten Modellprobleme werden als Lösungen einer HWG der Form (3.12) beschrieben, die die Nebenbedingung (3.14) erfüllen. (3.12) ist eine homogene FIGl 1. Art. Um eine approximative Lösung dieser IGl zu erhalten, ist man auf einfache Quadraturformeln angewiesen, die auf das homogene Gleichungssystem

$$\sum_{i=1}^N K_{ji} w_i \tilde{c}_i = 0 \quad j = 1, \dots, N \quad (3.16)$$

führen. Die Lösung $\tilde{c} = \{\tilde{c}_i\}$ muß die Nebenbedingung

$$\sum_{i=1}^N \tilde{c}_i w_i = 1 \quad (3.17)$$

erfüllen. Man kann algebraische Lösungen für (3.16) und (3.17) finden, die jedoch mit der Lösung von (3.12) und (3.14) nicht zusammenfallen müssen. Allerdings zeigt sich, daß es immer solche algebraischen Lösungen $\tilde{c}$ gibt, die die Streuphase und die WF des untersuchten Potentials korrekt wiedergeben.

Könnte man ähnlich der Methode von de Takacsy [Ta 72] die HWG (3.12) als inhomogene FIGl 1. Art schreiben, so wäre man besser in der Lage, die numerischen Ergebnisse anhand analytischer Aussagen zu überprüfen. Leider hat die Gewichtsfunktion $c(\underline{\alpha})$ in (3.12) keine anschauliche Bedeutung, so daß man sie nicht in

zwei Anteile aufspalten kann, deren einer unbekannt, der andere aber bekannt ist.

3.2.1 Modifizierter HW-Ansatz

Als Möglichkeit, eine inhomogene FIGl 1. Art als HWG zu erhalten, dient ein modifizierter HW-Ansatz der Form

$$u_1(r) = \int d\underline{\alpha} \ c_1(\underline{\alpha}) \ \chi_1(\underline{\alpha}, r) - C_1 \ \bar{u}_1(r) \quad (3.18)$$

Die resultierende HWG lautet

$$\int d\underline{\alpha} \ K_1(\underline{\beta}, \underline{\alpha}) \ c_1(\underline{\alpha}) = C_1 \ g_1(\underline{\beta}) \quad (3.19)$$

$K_1(\underline{\beta}, \underline{\alpha})$ ist mit dem Kern (3.13) identisch. Generell kann man die Funktion $\bar{u}_1(r)$ beliebig wählen, allerdings muß sie mit den Rand- und Normierungsbedingungen der Streu-WF $u_1(r)$ verträglich sein. Alle durchgeführten Rechnungen haben ergeben, daß zur korrekten Beschreibung von $u_1(r)$ im HW-Ansatz ein Anteil der potentialfreien Bewegung enthalten sein muß. Daher haben wir für $\bar{u}_1(r)$ die WF der freien Bewegung $\hat{j}_1(kr)$ genommen. Die rechte Seite von (3.19) ist also das Integral

$$g_1(\underline{\beta}) = - \int_0^\infty dr \ \chi_1(\underline{\beta}, r) \ V(r) \ \hat{j}_1(kr) \quad (3.20)$$

Wählt man als GC die Potentialtopfbreite R , so hat $g_1(R)$ ähnliche Eigenschaften wie der Kern $K_1(R', R)$; speziell gilt

$$\lim_{R \rightarrow 0} g_1(R) = \lim_{R \rightarrow \infty} g_1(R) = - \frac{\lambda_{BN}}{k}$$

Aus der asymptotischen Form des HW-Ansatzes (3.18) folgen die Nebenbedingung

$$\int d\underline{\alpha} \ c_1(\underline{\alpha}) = 1 + C_1 \quad (3.21)$$

für die Lösung $c_1(\underline{\alpha})$ von (3.19) und als Darstellung für die Streuphase die Beziehung (3.15).

Der HW-Ansatz (3.18) mit $\bar{u}_1(r) = \hat{j}_1(kr)$ läßt sich folgendermaßen interpretieren: Der Zusatzterm $C_1 \hat{j}_1(kr)$ bietet eine direkte Möglichkeit, die freie Bewegung in $u_1(r)$ richtig wiederzugeben, während der Ansatz (3.10) dies nur durch geeignete Wahl der Modellpotentiale lieferte. Die Konstante C_1 , die endlich sein soll, kann man als Größe deuten, die den unter dem Integral enthaltenen Anteil der freien Bewegung mit dem in $u_1(r)$ enthaltenen in Übereinstimmung bringt.

3.2.2 Diskussion von inhomogenen FIGlen 1. Art

Gleichung (3.19) ist eine inhomogene FIGl 1. Art, die einen linearen Integraloperator K mit dem Kern $K_1(\underline{\beta}, \underline{\alpha})$ besitzt. Der Funktionenraum der Lösung $c_1(\underline{\alpha})$ wird durch die Norm von K und den Funktionenraum, zu dem die rechte Seite $g_1(\underline{\beta})$ gehört, bestimmt [Ba 77, S. 22] :

Tab. 1:

Norm von ϕ ; Funktionenraum	Operatornorm von K ; Integraloperator :
	$(K\phi)(x) = \int_a^b K(x,y)\phi(y)dy$
Annahme: $K(x,y)$ hat solche Eigenschaften, daß K einen gewählten Raum auf sich selbst abbildet.	
$ \phi(x) _1 = \int_a^b \phi(t) dt ;$ $C[a,b], R[a,b], \mathcal{L}_1[a,b]$	$ K _1 = \sup_{a \leq y \leq b} \int_a^b K(x,y) dx$
$ \phi(x) _2 = \{ \int_a^b \phi(t) ^2 dt \}^{1/2} ;$ $C[a,b], R[a,b], \mathcal{L}_2[a,b]$	$ K _2 \leq \{ \int_a^b \int_a^b K(x,y) ^2 dx dy \}^{1/2}$
$ \phi(x) _\infty = \sup_{a \leq t \leq b} \phi(t) ;$	$ K _\infty = \sup_{a \leq x \leq b} \int_a^b K(x,y) dy$
$C[a,b], R[a,b]$	

Außerdem gilt das grundlegende Theorem von Radon [ZKK 75, S.90]; der Integralbegriff wird hier und im folgenden im Lebesgue'schen Sinne verstanden und ist mit dem Riemann'schen für stetige Funktionen identisch. Es lautet:

Ein linearer Integraloperator K mit dem Kern $K(x,t)$ bildet den Raum $\mathcal{X}_p$ ($1 \leq p < \infty$) in den Raum C , den Raum der stetigen Funktionen, genau dann ab, wenn für alle $x \in \Omega$, dem Definitionsbereich von x ,

a) falls $p > 1$, die Bedingung

$$\phi(x) = \int_{\Omega} |K(x,t)|^{p'} dt \leq k < \infty \quad \forall x \in \Omega, p' = p/(p-1)$$

falls $p = 1$, die Bedingung

$$\phi(x) = \text{vrai max}_{t \in \Omega} |K(x,t)| \leq k < \infty \quad \forall x \in \Omega$$

und

b) für jede meßbare Untermenge $D \subset \Omega$ und beliebiges $x_0 \in \Omega$ die Gleichung

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \int_D K(x,t) dt = \int_D K(x_0,t) dt$$

erfüllt sind.

Wenn $K(x,t)$ in x und t stetig ist, fällt das wesentliche Supremum mit dem Maximum zusammen; der Kern muß dann die Maximumnorm

$$\phi(x) = \max_{t \in \Omega} |K(x,t)| \leq k < \infty \quad \forall x \in \Omega$$

erfüllen.

Die übliche Methode der Diskretisierung der HWG ist mit folgenden grundsätzlichen Schwierigkeiten verbunden [Ba 77, S. 635ff]: Es gilt eine Faustregel, die besagt, daß die IGL eine um so inkorrekt gestellte Aufgabe ist, je glatter der Integralkern ist. Die Ersetzung des Integrals durch eine endliche Summe mittels Quadraturformel liefert für die HWG (3.19) die Gleichung

$$\sum_{i=1}^N K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}_i) w_i c(\underline{\alpha}_i) = C g(\underline{\beta}) + \varepsilon$$

wo $\underline{\alpha}_i$ die Stützstellen, w_i die Gewichte und ε der Fehler der Quadraturformel ist. Der Index l wurde - wie im folgenden auch - unterdrückt. Die numerische Lösung der Gleichung

$$\sum_{i=1}^N K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}_i) w_i \tilde{c}(\underline{\alpha}_i) = C g(\underline{\beta})$$

bei der der Fehler ε als klein vernachlässigt wurde, existiert nur dann, wenn die rechte Seite $g(\underline{\beta})$ eine Linearkombination der Funktionen $K(\underline{\beta}, \underline{\alpha}_i)$, $i = 1, \dots, N$ ist. Diese Lösung braucht auch dann nicht zu existieren, wenn die zugehörige IGl eine Lösung besitzt. Wählt man für die Variable $\underline{\beta}$ bestimmte Stützstellen $\underline{\beta}_j$, die nicht mit den $\underline{\alpha}_i$ zusammenfallen müssen, so kann man normalerweise eine Lösung des Gleichungssystems

$$\sum_{i=1}^N K(\underline{\beta}_j, \underline{\alpha}_i) w_i \tilde{c}(\underline{\alpha}_i) = C g(\underline{\beta}_j) \quad j = 1, \dots, N$$

finden, vorausgesetzt $\det [K(\underline{\beta}_j, \underline{\alpha}_i)] \neq 0$. Die algebraische Lösung $\tilde{c}(\underline{\alpha}_i)$, $i = 1, \dots, N$ braucht keine Näherungslösung von $c(\underline{\alpha})$ zu sein.

Bei den untersuchten Modellproblemen zeigte sich, daß in manchen Fällen die numerische Näherung $\tilde{c}(\underline{\alpha}_i)$, $i = 1, \dots, N$ wohl sehr gut mit der exakten Lösung übereinstimmt, während dies in anderen Fällen offenbar nicht der Fall ist.

Im folgenden wird gezeigt, daß die analytische Lösung $c(\underline{\alpha})$ in allen untersuchten Modellproblemen zum Raum $\mathcal{L}_1$ gehört und eine Stammfunktion besitzt, die zum Raum der Funktionen von b.V. gehört.

Zunächst wird die Struktur der Kerne und rechten Seiten der HWG für die einzelnen Potentiale betrachtet.

3.2.2.1 Der Kern und die rechte Seite der HWG

Wie die folgenden graphischen Darstellungen veranschaulichen, sind der Kern $K(R',R)$ und die rechte Seite $g(R)$ der HWG stetige Funktionen ihrer Variablen mit höchstens endlich vielen Sprungstellen. Die am weitesten links liegende tritt bei dem Wert von R auf, für den das Modellpotential der Beziehung $|v(R,r)| = k^2$ genügt.

Alle auftretenden Integralkerne sind nicht symmetrisch und erfüllen die Gleichung (3.6), die hier explizit als

$$K(R',R) - K(R,R') = \frac{1}{k} \left[\operatorname{tg} \delta(R) - \operatorname{tg} \delta(R') \right]$$

berechnet wird.

Wie zu erwarten ist, zeigen die Diagonale $K(R,R)$ des Kerns und die rechte Seite ein ähnliches funktionales Verhalten. Man erkennt, daß die Struktur dieser Funktionen entscheidend von der Wahl des Modellpotentials $v(R,r)$ beeinflusst wird.

In den folgenden Abbildungen sind jeweils die rechte Seite $g(R)$, die Diagonale und zwei charakteristische Zeilen des diskretisierten Kerns dargestellt.

a) s-Wellen-Streuung am attraktiven Exp-Potential (HWSR)

Aus Abb. 10 - 17, die den Kern $K(R',R)$ und die rechte Seite $g(R)$ für $k = .25$ darstellen, erkennt man folgende, für numerische Rechnungen wichtige Merkmale: Das Modellpotential VS2 produziert einen wesentlich stärker strukturierten Kern als VS1. Es wird sich zeigen, daß die Lösung $c(R)$ der HWG für VS2 wesentlich stabiler ist als für VS1, wo die Lösung stark oszilliert. In diesem Fall ist die Faustregel bestätigt, daß glatte Kerne instabilere Lösungen liefern als Kerne mit starker Struktur.

b) p-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential (HWPR)

Der Kern und die rechte Seite der HWG für p-Wellen-Streuung zeigen deutliche Unterschiede zur s-Wellen-Streuung.

Erstens sind sie numerisch kleiner und auch glatter als bei der s-Wellen-Streuung, zweitens verliert sich die starke

Struktur für VS2, das bei den s-Wellen sehr stabile Lösungen produziert. Dieses funktionale Verhalten von $K(R',R)$ und $g(R)$ ist eine entscheidende Ursache für die auftretenden Schwierigkeiten bei der Lösung der HWG. In Abb. 18 - 25 sind der Kern und die rechte Seite für $k = .25$ dargestellt.

c) s-Wellen-Streuung am abstoßenden Exp-Potential (HWBR)

Das abstoßende Exp-Potential besitzt einen klassisch erlaubten und verbotenen Bereich. Der Kern bekommt eine stärkere Struktur, da die Modell-WFen sich aus Anteilen für beide Bereiche zusammensetzen. Jedoch verursachen die Unstetigkeiten von $K(R',R)$ und $g(R)$ numerische Probleme bei der Lösung der HWG. Das Modellpotential VB1, bei dem in $K(R',R)$ und $g(R)$ weniger Unstetigkeiten auftreten, ist für numerische Rechnungen besser geeignet. Abb. 26 - 33 zeigen $K(R',R)$ und $g(R)$ bei $k = .5$.

d) s-Wellen-Streuung am Morsepotential (HWMOR)

Die in Abschn. 3.1.2.4 erwähnte Tatsache, daß das Modellpotential VM2 gute numerische Ergebnisse liefert, obwohl es keine Potentialtöpfe repräsentiert, läßt sich anhand der Abb. 34 - 41 leicht erklären. Beide Modellpotentiale VM1 und VM2 erzeugen Kerne und rechte Seiten, die in ihrer Struktur und ihren numerischen Werten ähnlich sind. Obwohl das Morsepotential ein komplexeres Potential als das abstoßende Exp-Potential ist, zeigen $K(R',R)$ und $g(R)$ keine unregelmäßigere Struktur. Das mag damit zu erklären sein, daß die erzeugenden Funktionen $\chi(R,r)$ im Prinzip in beiden Fällen gleich sind. $K(R',R)$ und $g(R)$ sind in Abb. 34 - 41 für $k = 1$. aufgetragen.

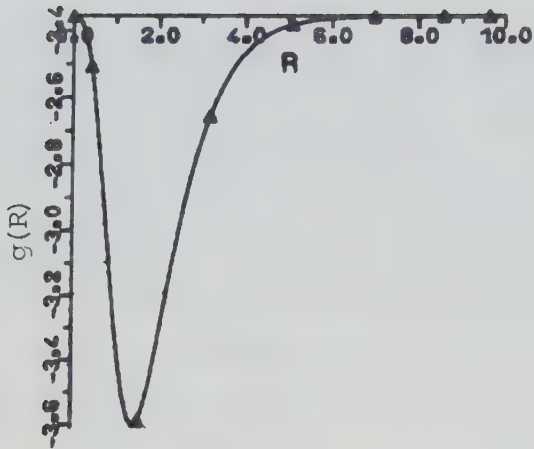


Abb. 10: HWSR, VS1, $k = .25$
rechte Seite $g(R)$

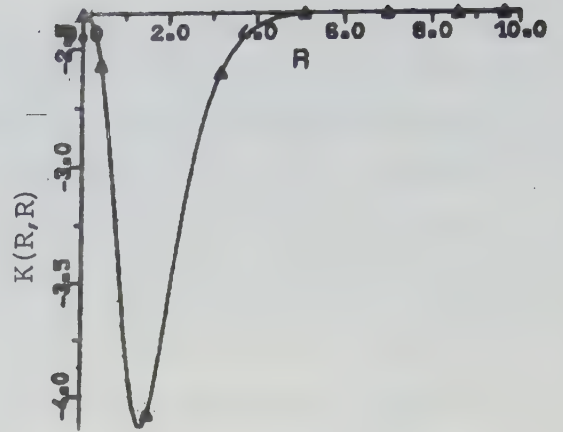


Abb. 11: HWSR, VS1, $k = .25$
Diagonale des Kerns

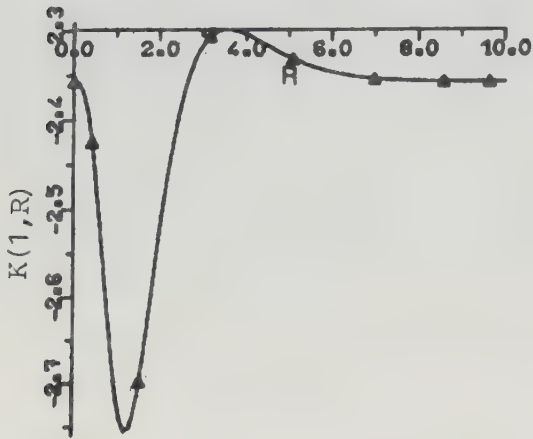


Abb. 12: HWSR, VS1, $k = .25$
1. Zeile des Kerns

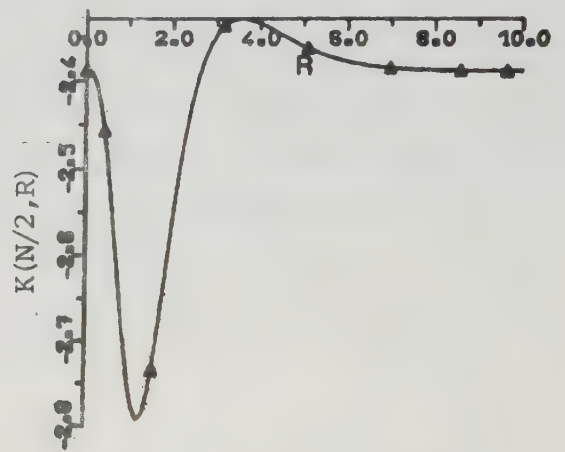


Abb. 13: HWSR, VS1, $k = .25$
mittlere Zeile d. Kerns

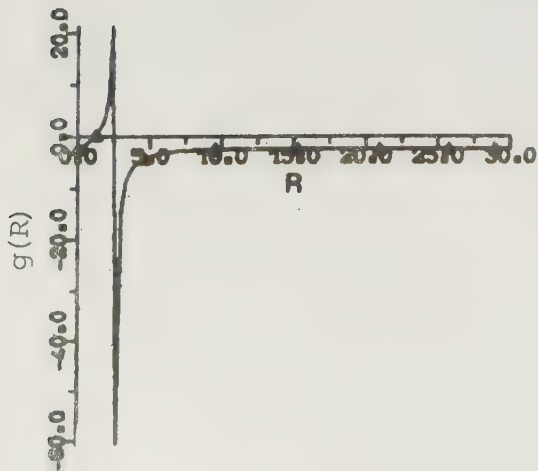


Abb. 14: HWSR, VS2, $k = .25$
rechte Seite $g(R)$

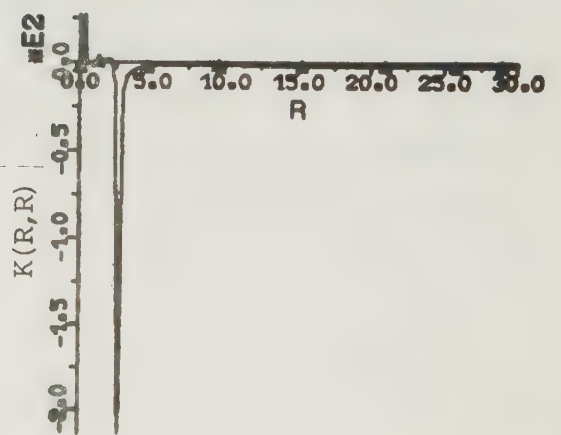


Abb. 15: HWSR, VS2, $k = .25$
Diagonale des Kerns

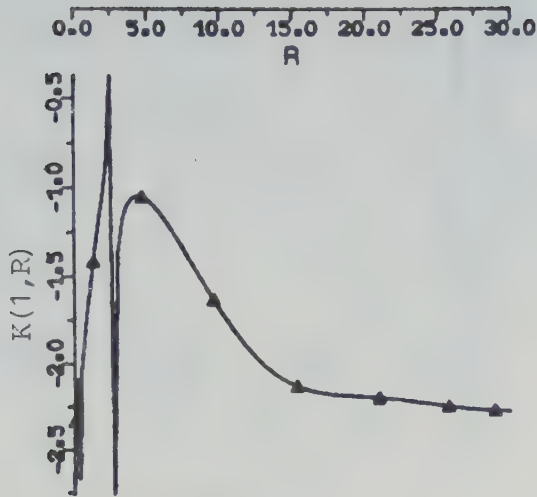


Abb. 16: HWSR, VS2, $k = .25$
1. Zeile des Kerns

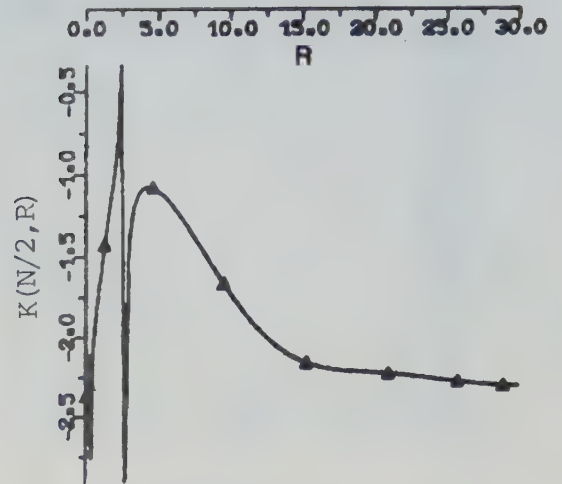


Abb. 17: HWSR, VS2, $k = .25$
mittlere Zeile d. Kerns

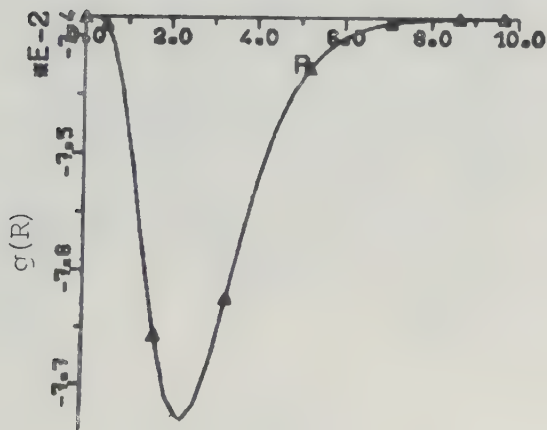


Abb. 18: HWPR, VS1, $k = .25$
rechte Seite $g(R)$

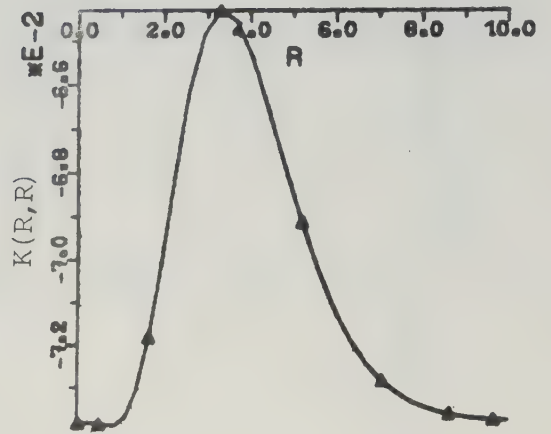


Abb. 19: HWPR, VS1, $k = .25$
Diagonale des Kerns

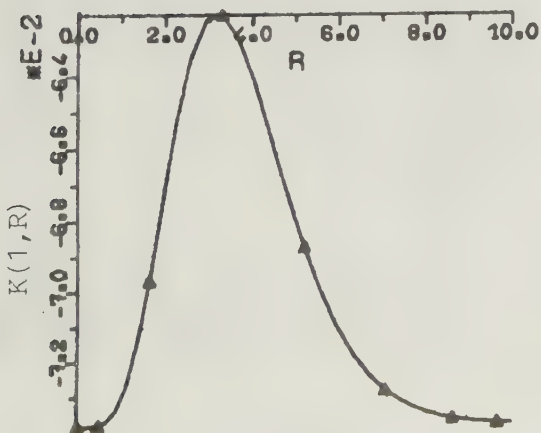


Abb. 20: HWPR, VS1, $k = .25$
1. Zeile des Kerns

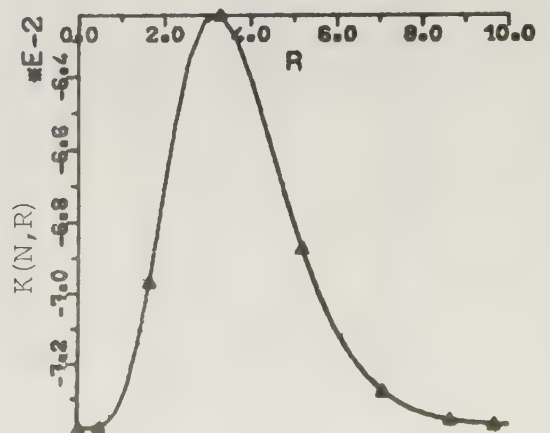


Abb. 21: HWPR, VS1, $k = .25$
letzte Zeile d. Kerns

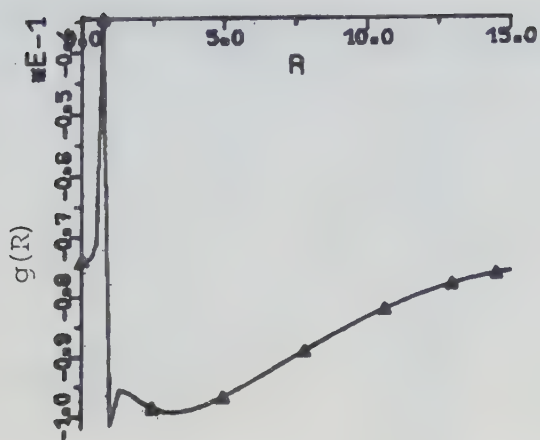


Abb. 22: HWPR, VS2, $k = .25$
rechte Seite $g(R)$

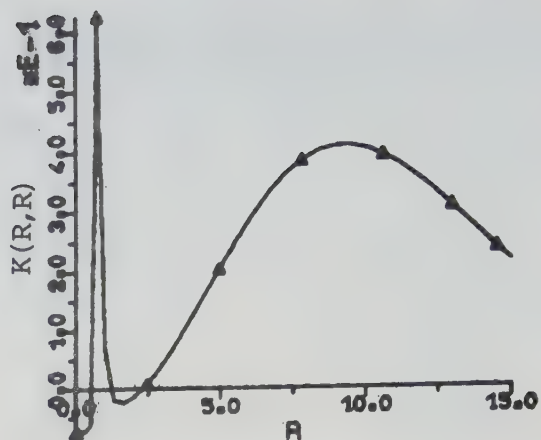


Abb. 23: HWPR, VS2, $k = .25$
Diagonale des Kerns

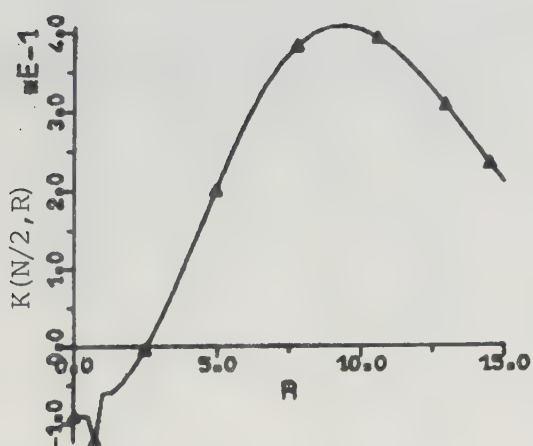


Abb. 24: HWPR, VS2, $k = .25$
mittlere Zeile d. Kerns

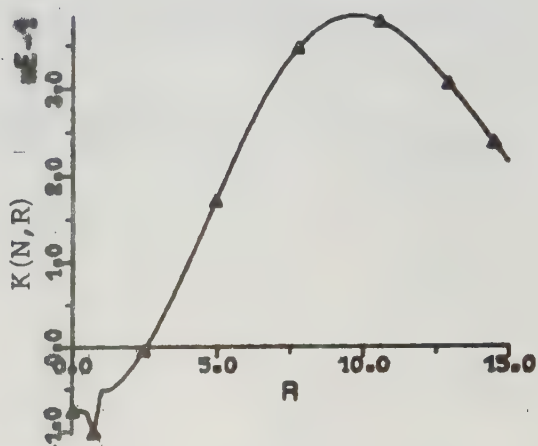


Abb. 25: HWPR, VS2, $k = .25$
letzte Zeile d. Kerns

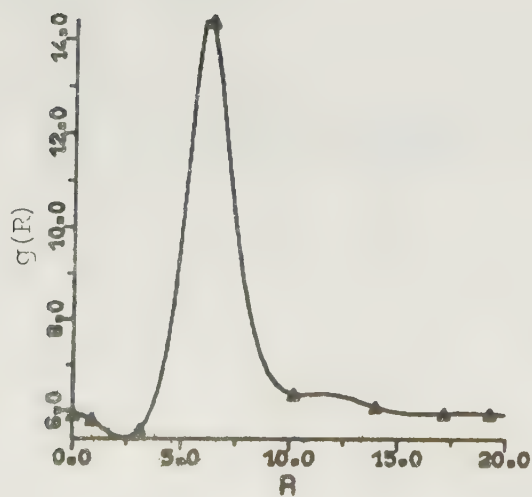


Abb. 26: HWBR, VB1, $k = .5$
rechte Seite $g(R)$

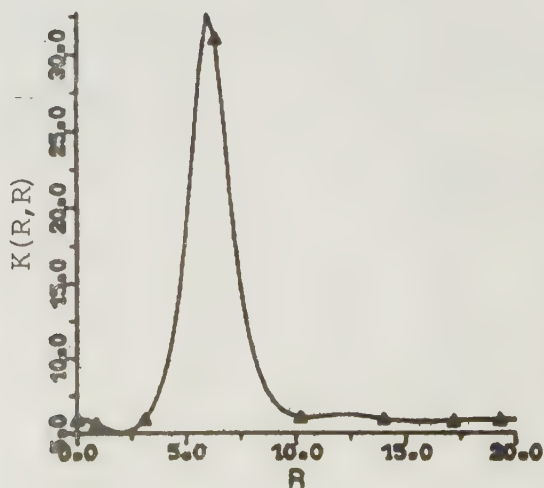


Abb. 27: HWBR, VB1, $k = .5$
Diagonale des Kerns

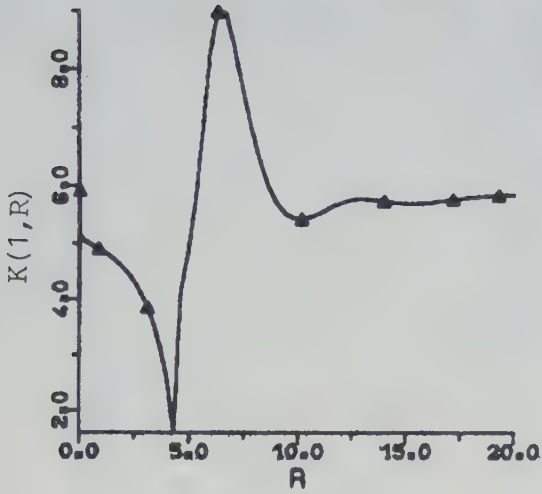


Abb. 28: HWBR, VB1, $k = .5$
1. Zeile des Kerns

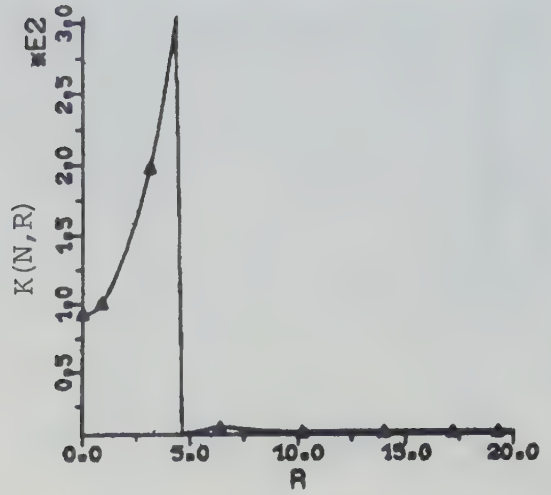


Abb. 29: HWBR, VB1, $k = .5$
letzte Zeile d. Kerns

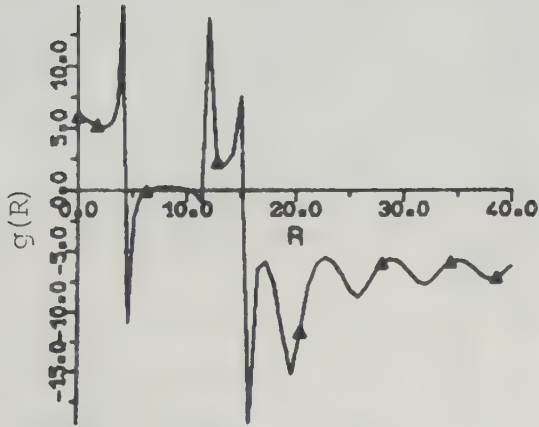


Abb. 30: HWBR, VB3, $k = .5$
rechte Seite $g(R)$

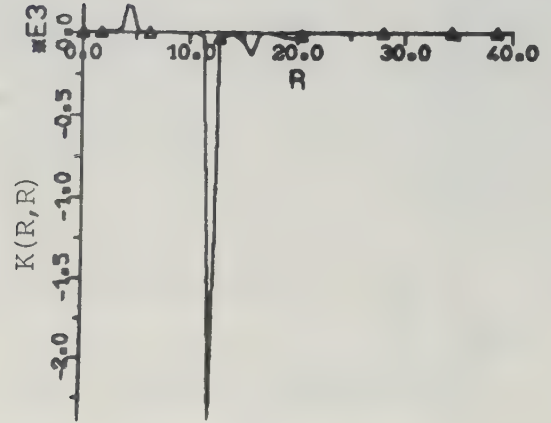


Abb. 31: HWBR, VB3, $k = .5$
Diagonale des Kerns

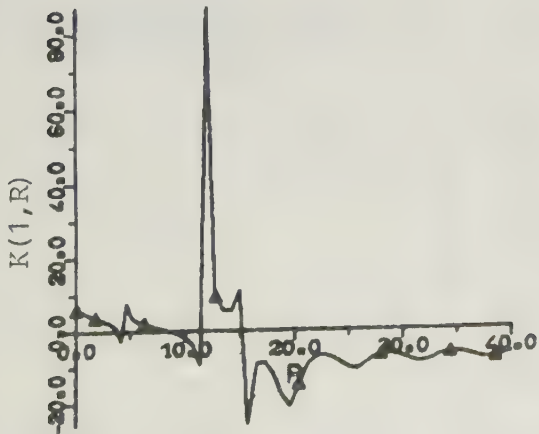


Abb. 32: HWBR, VB3, $k = .5$
1. Zeile des Kerns

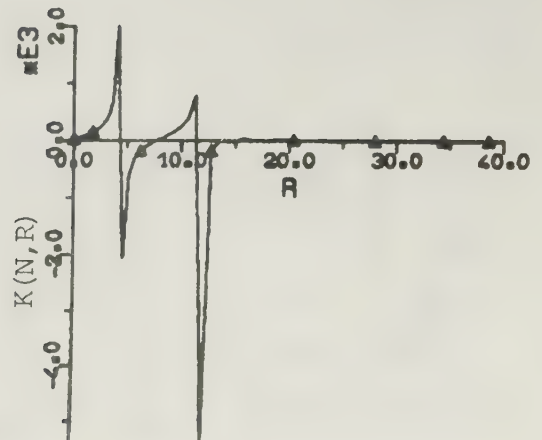


Abb. 33: HWBR, VB3, $k = .5$
letzte Zeile d. Kerns

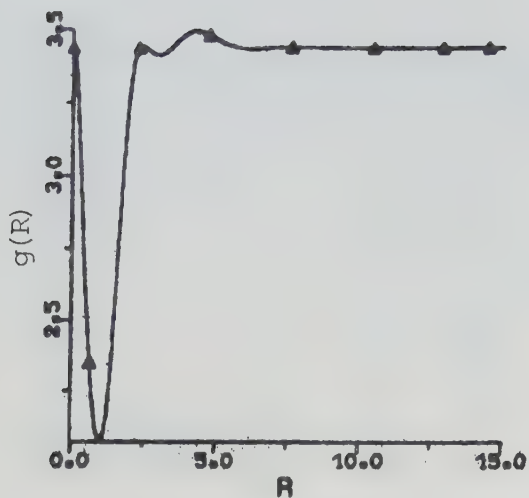


Abb. 34: HWMOR, VM1, $k = 1$.
rechte Seite $g(R)$

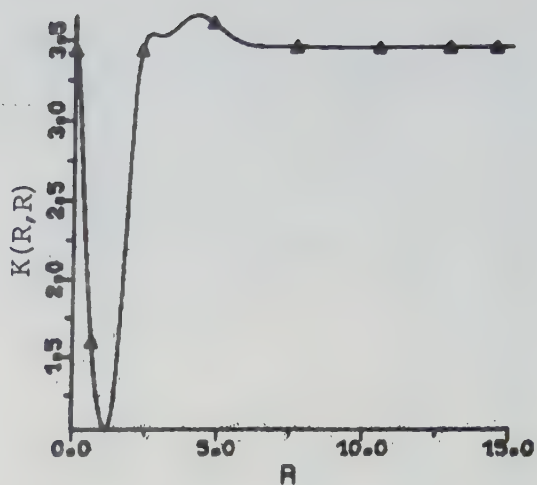


Abb. 35: HWMOR, VM1, $k = 1$.
Diagonale des Kerns

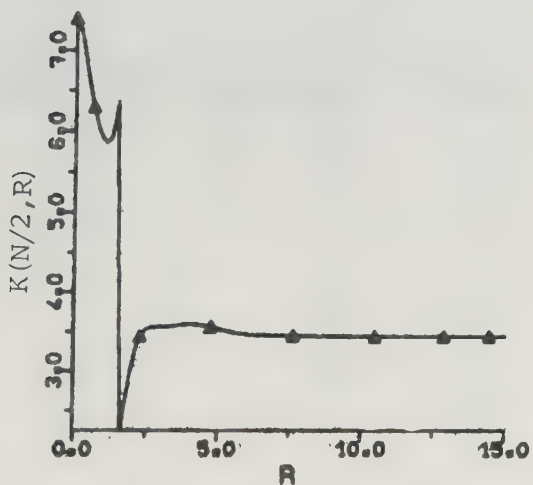


Abb. 36: HWMOR, VM1, $k = 1$.
mittlere Zeile d. Kerns

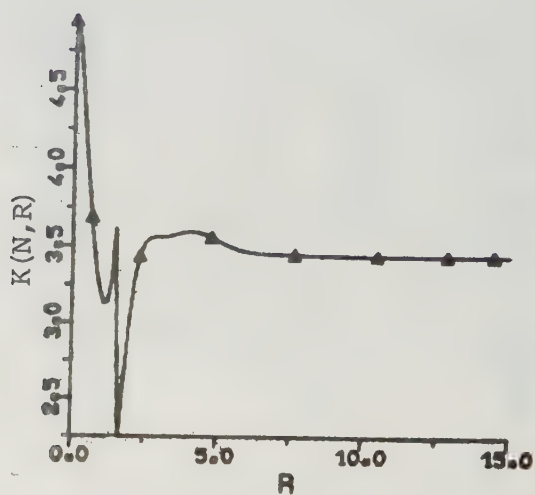


Abb. 37: HWMOR, VM1, $k = 1$.
letzte Zeile d. Kerns

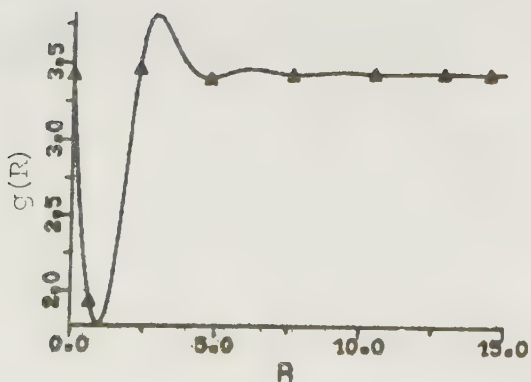


Abb. 38: HWMOR, VM2, $k = 1$.
rechte Seite $g(R)$

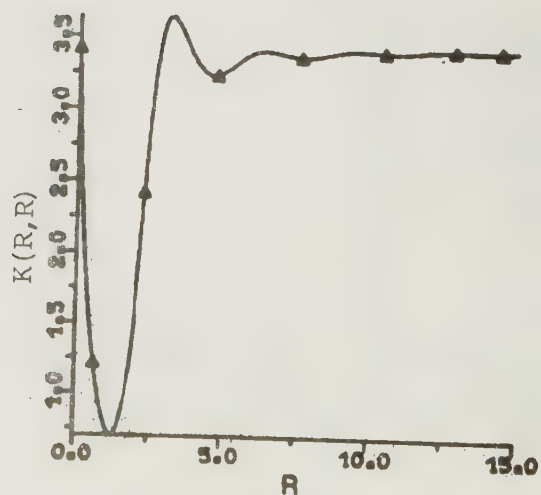


Abb. 39: HWMOR, VM2, $k = 1$.
Diagonale des Kerns

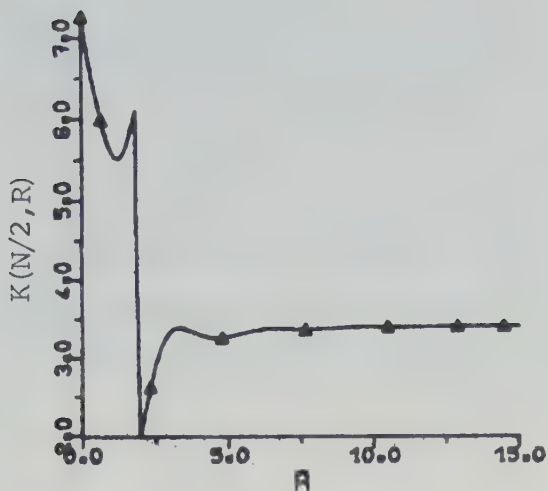


Abb. 40: HWMOR, VM2, $k = 1$.
mittlere Zeile d. Kerns

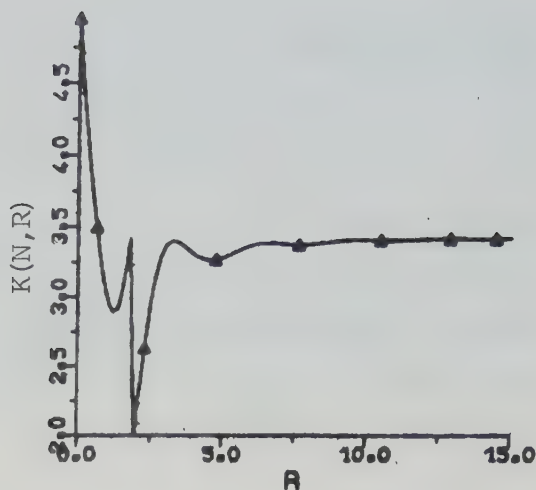


Abb. 41: HWMOR, VM2, $k = 1$.
letzte Zeile d. Kerns

3.2.3 Lösung der modifizierten HWG

Im vorigen Abschnitt wurde gezeigt, daß der Kern und die rechte Seite der HWG (3.19) stetig in R' und R sind oder höchstens endliche Sprungstellen besitzen. Allerdings sind $K(R', R)$ und $g(R)$ nicht quadratintegrierbar auf dem Intervall $[0, \infty]$. Nun soll bewiesen werden, daß die Gewichtsfunktion $c(R) \in \mathcal{L}_1$ ist und eine Stammfunktion besitzt, die zum BR $V^0[a, b]$ der Funktionen von b.V. gehört.

3.2.3.1 Funktionen von beschränkter Variation

Die Funktionen von b.V. sind folgendermaßen definiert [KF 75, S. 332]:

Gegeben sei eine auf dem Intervall $[a, b]$ definierte, reelle Funktion $F(x)$. Sie heißt von b.V., wenn es eine Konstante C gibt, sodaß für jede Zerlegung des Intervalls $[a, b]$ durch die Punkte

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$$

die Ungleichung

$$\sum_{i=1}^N |F(x_k) - F(x_{k-1})| \leq C$$

erfüllt ist.

Ist $F(x)$ von b.V. und auf $[a, b]$ definiert, dann heißt die obere Grenze dieser Summe, gebildet für alle möglichen Zerlegungen des Intervalls $[a, b]$ vollständige (totale) Variation der Funktion $F(x)$ auf $[a, b]$, in Zeichen $V_b^a[F]$, d. h.

$$V_b^a[F] = \sup \sum_{i=1}^N |F(x_k) - F(x_{k-1})|$$

Das Intervall $[a, b]$ kann mit der gesamten Zahlengeraden identisch sein, d. h. $a = -\infty$ und $b = +\infty$.

Die totale Variation einer Funktion $F(x)$ hat für jede integrierbare Funktion $f(x)$ eine anschauliche Bedeutung [Na 75, S. 287]: Sei $f(x)$ auf $[a, b]$ integrierbar und besitze die Stammfunktion

$$F(x) = \int_a^x f(t) dt$$

dann ist die totale Variation von $F(x)$ gleich

$$V_a^b[F] = \int_a^b |f(t)| dt$$

Hierzu ist zu bemerken, daß jede auf $[a, b]$ integrierbare Funktion $f(x)$ auch absolut integrierbar ist.

Weitere Eigenschaften der Funktionen von b.V. lauten:

Die Ableitung einer Funktion $F(x)$ von b.V. ist f.ü. differenzierbar und ihre Ableitung $f(x) = F'(x)$ gehört zu $\mathcal{L}_1 \subset (\mathbb{R})$ [Ru 66, S. 166]. Die Funktion $F(x)$ kann immer als Differenz zweier monoton nichtfallender Funktionen $F_1(x)$ und $F_2(x)$ dargestellt werden,

nämlich [KF 75, S. 335] :

$$F_1(x) = \frac{1}{2} \left[V_a^x [F] + F(x) \right]$$

$$F_2(x) = \frac{1}{2} \left[V_a^x [F] - F(x) \right]$$

Weiter bilden die Funktionen von b.V., die die Bedingung $F(a) = 0$ erfüllen, mit der Norm

$$||F|| = V_a^b [F]$$

einen linearen, normierten Raum $V^0[a,b]$, den Raum der Funktionen von b.V.. $V^0[a,b]$ ist ein BR [KF 75, S. 336].

Die Funktionen von b.V. definieren die Menge aller linear stetigen Funktionale $l[\phi]$ über $C[a,b]$, der Menge aller auf $[a,b]$ stetigen Funktionen $\phi(x)$. Diese Funktionale sind gegeben durch die Riemann-Stieltjes-Integrale [Gr 75, S. 125] :

$$l[\phi] = \int_a^b \phi(x) dF(x)$$

Die Funktionen $G(x) \in V^0[a,b]$, die eine auf $[a,b]$ von Null auf Eins monoton wachsende Funktion darstellen, heißen Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktionen und ihre Ableitung $g(x) = G'(x)$ Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung. $G(x)$ erzeugt ein eindeutiges Wahrscheinlichkeitsmaß μ_G [Ba 74, S. 144] :

$$\mu_G = G(b) - G(a) = \int_a^b g(x) dx$$

3.2.3.2 Die Bedeutung der Gewichtsfunktion

Im folgenden wird bewiesen, daß die Lösungen der HWGen (3.12) und (3.19) absolut integrierbare Funktionen sind, deren Stammfunktion zu $V^0[\Omega]$ gehört.

Vorausgesetzt, die Lösung $c(R)$ der HWG erfülle die "Normierungsbedingung" (3.14) bzw. (3.21), so existiert das Integral

$$I_1 = \int_{\Omega} dR \, c(R) = 1 + C \quad , \quad R \in \Omega = [R_{\min}, R_{\max}] \quad (3.22)$$

Im folgenden kann die Konstante C ungleich Null sein, d. h. man wählt den HW-Ansatz (3.18), oder gleich Null sein. Dies entspricht dem HW-Ansatz (3.11).

Aus der Existenz von I_1 folgt die Existenz des Integrals

$$I_2 = \int_{\Omega} dR \, |c(R)|$$

Die GC-Funktion $c(R)$ ist absolut integrierbar. Daher hat sie eine Stammfunktion

$$C(R) = \int_{R_{\min}}^R dR' \, c(R')$$

die von b.V. ist. Da $C(R)$ in allen untersuchten Problemen bei $R = 0$ verschwindet, gilt $C(R) \in V^0[\Omega]$ und

$$I_2 = V_{\Omega} [C] = \int_{\Omega} dR \, |c(R)|$$

Die "Normierungsbedingung" (3.22) kann folglich auch in der Form

$$I_1 = \int_{\Omega} dR \, c(R) = \int_{\Omega} dC(R)$$

geschrieben werden. Schreibt man den HW-Ansatz als

$$\hat{u}(r) = u(r) + C \hat{j}(kr) = \int_{\Omega} \chi(R, r) \, dC(R) \quad (3.23)$$

und betrachtet man die Koordinate r als Parameter, so kann man diesen Ausdruck als lineares stetiges Funktional $l[\chi]$ über $C[\Omega]$ auffassen:

$$l[\chi] = \int_{\Omega} \chi(R, r) \, dC(R) \quad \forall r \in [0, \infty]$$

Die Funktion $C(R) \in V^0[\Omega]$ ist - wie im vorigen Abschn. gezeigt

wurde - die Differenz zweier monoton nichtfallender Funktionen $C_1(R)$ und $C_2(R)$:

$$C(R) = C_1(R) - C_2(R)$$

mit

$$C_1(R) = \frac{1}{2} \left[V_{R_{\min}}^R [C] + C(R) \right] \quad (3.24)$$

und

$$C_2(R) = \frac{1}{2} \left[V_{R_{\min}}^R [C] - C(R) \right] \quad (3.25)$$

$C(R)$ erzeugt auf jeder Teilmenge $\Omega' \subset \Omega$ ein Lebesgue-Stieltjes-Maß

$$\mu_C(\Omega') = \mu_{C_1}(\Omega') - \mu_{C_2}(\Omega')$$

Da die Funktionen $C_1(R)$ und $C_2(R)$ bei $R = R_{\min}$ verschwinden, gehören sie ebenso wie $C(R)$ zum BR der Funktionen von b.V..

$C_1(R)$ und $C_2(R)$ besitzen den Wertebereich

$$0 \leq C_1(R) < \frac{1}{2} [I_2 + I_1] = I_3$$

und

$$0 \leq C_2(R) < \frac{1}{2} [I_2 - I_1] = I_4$$

Da sie von Null auf I_3 bzw. I_4 monoton nichtfallende Funktionen darstellen, kann man sie als verallgemeinerte Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktionen interpretieren. Sie unterscheiden sich nur darin von mathematischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen, daß sie statt auf Eins auf die Werte I_3 bzw. I_4 normiert sind. Sie erzeugen die verallgemeinerten Wahrscheinlichkeitsdichten

$$C'_1(R) = \frac{1}{2} [|C(R)| + C(R)]$$

$$C'_2(R) = \frac{1}{2} [|C(R)| - C(R)]$$

(3.23) läßt sich demnach schreiben als

$$\begin{aligned}\hat{u}(r) &= \int_{\Omega} \chi(R,r) dC_1(R) - \int_{\Omega} \chi(R,r) dC_2(R) \\ &= \int_{\Omega} dR C_1'(R) \chi(R,r) - \int_{\Omega} dR C_2'(R) \chi(R,r)\end{aligned}$$

Diese Gleichungen könnte man veranschaulichend dahingehend interpretieren, daß die Modellfunktionen $\chi(R,r)$ nicht als "Basis" im quantenmechanischen Sinne zur Beschreibung der Funktion $\hat{u}(r)$ dienen können. Während nämlich in der Quantenmechanik unter einer Basis normalerweise ein Satz von Funktionen verstanden wird, dessen Wichtung mit einer mathematischen Wahrscheinlichkeitsverteilung einen quantenmechanischen Zustand beschreibt, muß man in den hier untersuchten Fällen zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen überlagern, um eine Streu-WF zu erhalten. Die Gewichtsfunktion

$$c(R) = C_1'(R) - C_2'(R)$$

ist folglich die Differenz zweier verallgemeinerter Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. An dieser Stelle ist zu betonen, daß der in der Quantenmechanik übliche Begriff der Wahrscheinlichkeitsdichte mit dem hier verwendeten nicht zusammenfällt.

In Spezialfällen kann sogar die Funktion $C(R)$ selbst eine verallgemeinerte Wahrscheinlichkeitsverteilung sein. Bei der s-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential wurden solche Lösungen $c(R)$ gefunden, deren Stammfunktion $C(R)$ eine von Null auf $1 + C$ monoton wachsende Funktion ist. In diesem Fall ist das Lebesgue-Stieltjes-Maß $\mu_C(\Omega)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß, für das gilt

$$\mu_C(\Omega) = \int_{\Omega} dC(R) = \int_{\Omega} dR c(R) = 1 + C$$

Die Gewichtsfunktion $c(R)$ ist dann eine verallgemeinerte Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Tatsache, daß hier die Funktion $C(R)$ nicht auf Eins normiert ist, hängt an der "Normierung" der physikalischen WF $u(r)$. Eine andere "Normierung" von $u(r)$ lieferte eine mathematische Wahrscheinlichkeitsverteilung $\bar{C}(R)$

und damit verbundene Wahrscheinlichkeitsdichte $\bar{c}(R)$. Dies soll nun gezeigt werden:

Sei

$$\bar{u}(r) = \frac{\hat{u}(r)}{1+C}$$

eine neu normierte WF, so lautet der HW-Ansatz (3.23)

$$\bar{u}(r) = \frac{1}{1+C} \int_{\Omega} \chi(R,r) dC(R) = \int_{\Omega} \chi(R,r) d\bar{C}(R)$$

mit

$$\bar{C}(R) = \frac{C(R)}{1+C}$$

Aus der asymptotischen Form dieses Ansatzes ergeben sich die Beziehungen

$$\int_{\Omega} d\bar{C}(R) = 1 \quad \text{und} \quad \text{tg} \eta = (1+C) \int_{\Omega} \text{tg} \delta(R) d\bar{C}(R)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\bar{c}(R)$ gilt:

$$\bar{c}(R) = \bar{C}'(R)$$

Aufgrund des bisher Gesagten lassen sich eindeutige mathematische Aussagen über die Modellfunktionen $\chi(R,r)$ und den Kern $K(R',R)$ der HWG (3.19) machen:

Der HW-Ansatz (3.23) ist eine inhomogene FIGl 1. Art, deren rechte Seite $\hat{u}(r)$ zu $C[0,\infty]$ gehört. Der dem Integralkern $\chi(R,r)$ zugeordnete Integraloperator X bildet Funktionen $c(R) \in \mathcal{X}_1[\Omega]$ auf den Raum der stetigen Funktionen ab. Aus dem Theorem von Radon (Abschn. 3.2.2) folgt, daß $\chi(R,r)$ zu $\mathcal{X}_{\infty}$ gehört, denn der Kern $\chi(R,r)$ ist eine beschränkte Funktion der Variablen R und r , die die Bedingung

$$\phi(R) = \max_{r \in [0,\infty]} |\chi(R,r)| < \infty \quad \forall R \in \Omega$$

erfüllt. Außerdem genügt er der Gleichung

$$\lim_{R \rightarrow R_0} \int_{\Gamma} \chi(R, r) dr = \int_{\Gamma} \chi(R_0, r) dr, \quad \Gamma \subset [0, \infty]$$

Der Kern $\chi(R, r)$ hat die weitere Eigenschaft, daß

$$\lim_{R \rightarrow R_0} \text{vrai max}_{r \in [0, \infty]} |\chi(R, r) - \chi(R_0, r)| = 0$$

ist. Der Kern $\chi(R, r)$ erzeugt demnach einen kompakten Integraloperator X auf $\mathcal{X}_1$. Dieser genügt der Maximumnorm

$$\|X\|_{\mathcal{X}_1 \rightarrow C} = \|\phi(R)\|_{\mathcal{X}_\infty} = \max_{R \in \Omega} |\phi(R)| = \max_{\substack{r \in [0, \infty] \\ R \in \Omega}} |\chi(R, r)|$$

Bei der Diskussion der HWG (3.19) muß man zwei Fälle unterscheiden:

- a) Die rechte Seite $g(R)$ ist stetig in R . Dann bildet der Kern $K(R', R)$ die Funktion $c(R) \in \mathcal{X}_1[\Omega]$ auf $g(R') \in C[\Omega]$ ab und hat die gleichen Eigenschaften wie der Kern $\chi(R, r)$. Er erzeugt einen kompakten Integraloperator K auf $\mathcal{X}_1$, der die Maximumnorm

$$\|K\|_{\mathcal{X}_1 \rightarrow C} = \|\phi(R')\|_{\mathcal{X}_\infty} = \max_{R \in \Omega} |\phi(R')| = \max_{R', R \in \Omega} |K(R', R)|$$

mit

$$\phi(R') = \max_{R \in \Omega} |K(R', R)| < \infty \quad \forall R' \in \Omega$$

erfüllt.

- b) Die rechte Seite $g(R)$ weist eine Sprungstelle auf, ist also nicht stetig. Dann bildet der Kern $K(R', R)$ eine Funktion $c(R) \in \mathcal{X}_1[\Omega]$ auf eine Funktion $g(R') \in \mathcal{X}_\infty[\Omega]$ ab. Dieser Kern erzeugt einen nur beschränkten Integraloperator K auf $\mathcal{X}_1$ mit Maximumnorm [Jö 70, S. 164f].

Die Formulierung der GCM für die hier untersuchten Probleme der Potentialstreuung mit erzeugenden Funktionen, die stationäre Streu-WFen sind, bewirkt eine Transformation der Lösung

aus dem quantenmechanischen HR in den BR $\mathcal{L}_1[\Omega]$.

3.2.3.3 Die Rolle des Modellpotentials

Wenn auch prinzipiell die Lösungen $u(r)$ und η des untersuchten Problems nicht von der Wahl des Modellpotentials abhängig sind, so stellt man dennoch einen starken Einfluß des Modellpotentials auf die Lösung der HWG fest. Denn das Modellpotential bestimmt die erzeugenden Funktionen $\chi(R,r)$, die "Basis" des HW-Ansatzes. Diese wiederum beeinflussen die Struktur des Integralkerns $K(R',R)$ und der rechten Seite $g(R)$ der HWG. Je glatter $\chi(R,r)$ als Funktion von R bei festem r ist, desto glatter ist $K(R',R)$ und instabiler wird die Lösung $c(R)$ der HWG.

Die zu VS1 gehörenden glatten Funktionen $\chi_O(R,r)$ (Abb. 43) erzeugen die glatten Funktionen $K(R',R)$ und $g(R)$ in Abb. 10 - 13. Dagegen zeigen die zu VS2 gehörigen erzeugenden Funktionen eine Sprungstelle (Abb. 45), sodaß der entsprechende Kern und die rechte Seite der HWG stark strukturiert sind (Abb. 14 - 17). Ähnliche Zusammenhänge liefert die p-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential (Abb. 47, 49, 18 - 25). Auch beim abstoßenden Exp-Potential, das für $k = .5$ einen klassisch erlaubten und verbotenen Bereich besitzt, gehören zu den glatteren erzeugenden Funktionen $\chi_B(R,r)$ des Modellpotentials VB1 (Abb. 51) glattere Funktionen $K(R',R)$ und $g(R)$ (Abb. 26 - 29) als zu den Funktionen von VB3 (Abb. 53, 30 - 33). Die Ähnlichkeit der Kerne und rechten Seiten der Modellpotentiale VM1 und VM2 beim Morsepotential (Abb. 34 - 41) läßt sich aus der Ähnlichkeit der Testfunktionen $\chi_M(R,r)$ erklären (Abb. 55, 57).

Zum anderen bestimmt das Modellpotential das funktionale Verhalten der Modellstreuphase $\delta(R)$, die über (3.15) mit der gesuchten Streuphase verknüpft ist. Am geeignetesten ist ein $\delta(R)$, dessen Wertebereich das Intervall $[0, \pi]$ überdeckt (Abb. 44). Die Modellstreuphase liefert eine grobe Abschätzung für die Wahl des Definitionsbereichs der GC R . Der Maximalwert der GC $R_{\max}$

kann normalerweise in dem Bereich von R gewählt werden, wo die Modellstreuphase verschwindet. So zeigt sich z.B., daß $R_{\max}$ für VS1 bei p-Wellen-Streuung am attraktiven Exp-Potential kleiner gewählt werden kann als bei s-Wellen-Streuung, weil die entsprechende Modellstreuphase $\delta_1(R)$ (Abb. 46) bei kleinerem R physikalisch bedeutungslos ist als $\delta_0(R)$ (Abb. 42). Dagegen muß das zu VS2 gewählte $R_{\max}$ in beiden Fällen größer sein als bei VS1 (Abb. 44, 48). Entsprechend ist $R_{\max}$ für die Streuung am repulsiven Exp-Potential bei VB1 kleiner als bei VB3, da die zu VB1 gehörige Modellstreuphase $\delta_B(R)$ (Abb. 50) eher verschwindet als diejenige für VB3 (Abb. 52). Die Modellpotentiale VM1 und VM2 des Morsepotentials erzeugen physikalisch ähnliche Modellstreuphasen $\delta_M(R)$ (Abb. 54, 56).

Die Wahl des Definitionsbereichs Ω der GC R hat entscheidenden Einfluß auf die Berechnung der Streuphase η , die numerisch durch den Ausdruck

$$\gamma = \sum_{i=1}^N \tilde{c}(R_i) \operatorname{tg} \delta(R_i)$$

genähert wird. Nur bei geeignet gewähltem Ω stimmen γ und η überein. Genauso ist der HW-Ansatz (3.23) nur dann eine gute Näherung der gesuchten Streu-WF $\hat{u}(r)$, wenn Ω ein solches Intervall ist, daß die erzeugenden Funktionen $\chi(R, r)$, gewichtet mit der GC-Funktion $c(R)$, alle Eigenschaften der WF $\hat{u}(r)$ wiedergeben.

Bei der Diskretisierung der HWG bestimmt das Modellpotential die Stützstellenzahl N der Quadraturformel. Die geeignete Wahl von N hängt von der Struktur des Kerns der HWG ab. Einerseits liefert eine große Zahl N der Quadraturformel eine gute Approximation des Integrals der HWG, führt aber leicht auf singuläre Matrizen des entsprechenden Gleichungssystems. Andererseits ist die Näherung γ der Streuphase η bei zu klein gewähltem N schlecht.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß das Modellpotential direkten Einfluß auf das funktionale Verhalten des Kerns und der

rechten Seite der HWG hat. Es legt weiterhin den Definitionsbereich Ω der GC R so fest, daß die WF $u(r)$ des HW-Ansatzes (3.11) bzw. (3.18) die gesuchte Streulösung der SGI (3.8) hinreichend approximiert. Schließlich bestimmt das Modellpotential die optimale Stützstellenzahl N der Quadraturformel, mit der die HWGen (3.12) bzw. (3.19) gelöst werden.

Ein Beispiel eines unbrauchbaren Modellpotentials ist VS3 für die s-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential. Mit diesem Modellpotential ist es nicht gelungen, brauchbare Näherungen γ für die Streuphase η_0 zu erhalten. Im folgenden wird die numerische Lösung der HWG durch Diskretisierung diskutiert.

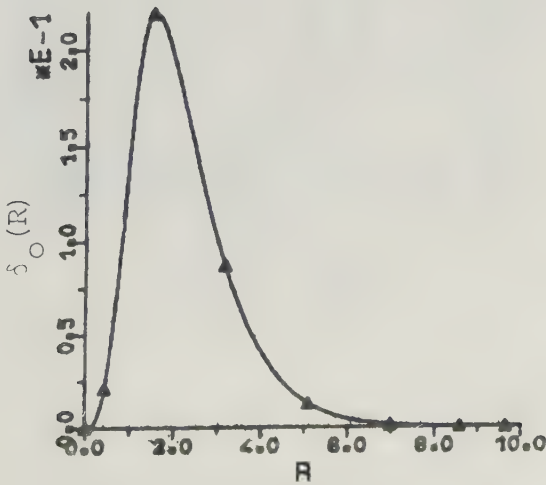


Abb. 42: Modellstreuphase
(HWSR, VS1, $k = .25$)

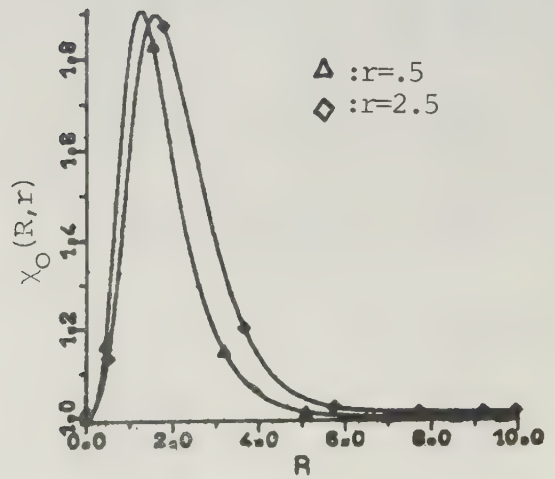


Abb. 43: Modellfunktionen
(HWSR, VS1, $k = .25$)

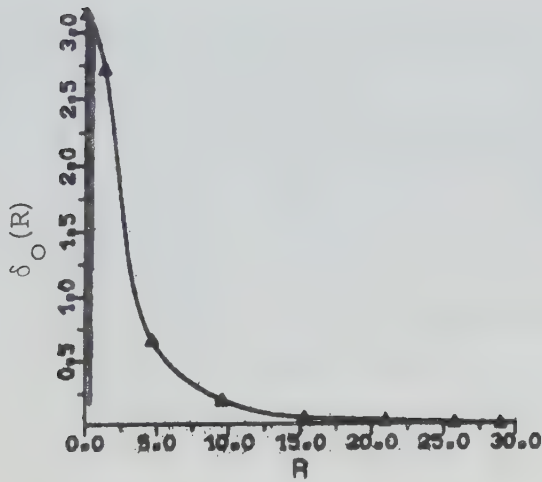


Abb. 44: Modellstreuphase
(HWSR, VS2, $k = .25$)

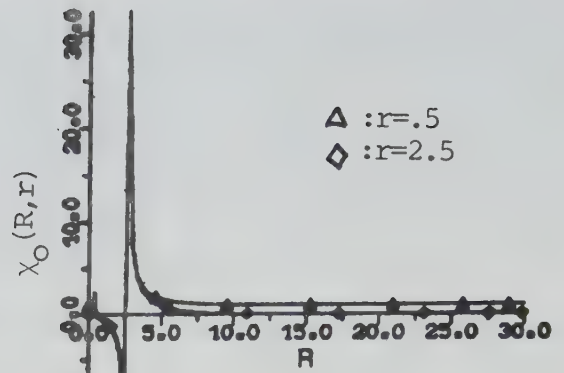


Abb. 45: Modellfunktionen
(HWSR, VS2, $k = .25$)

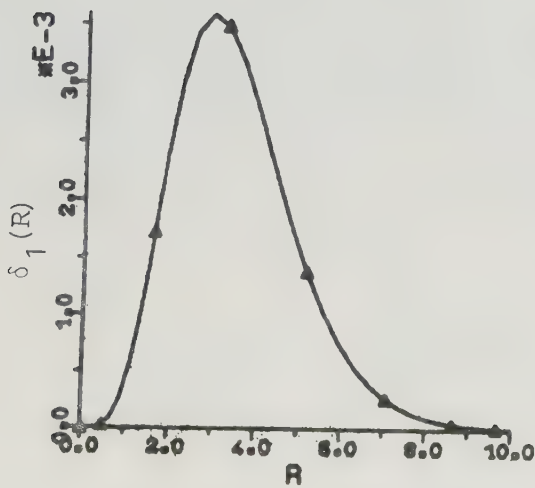


Abb. 46: Modellstreuphase
(HWPR, VS1, $k = .25$)

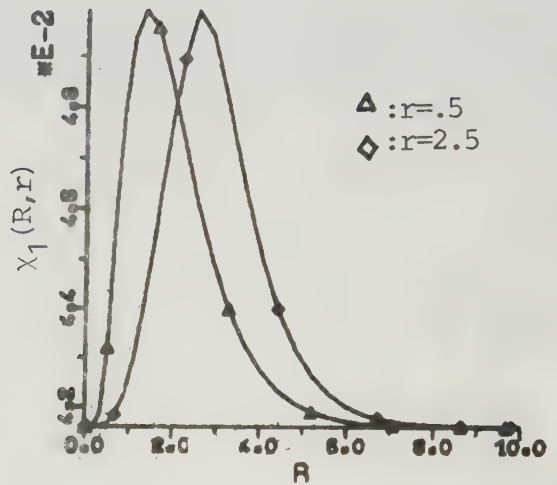


Abb. 47: Modellfunktionen
(HWPR, VS1, $k = .25$)

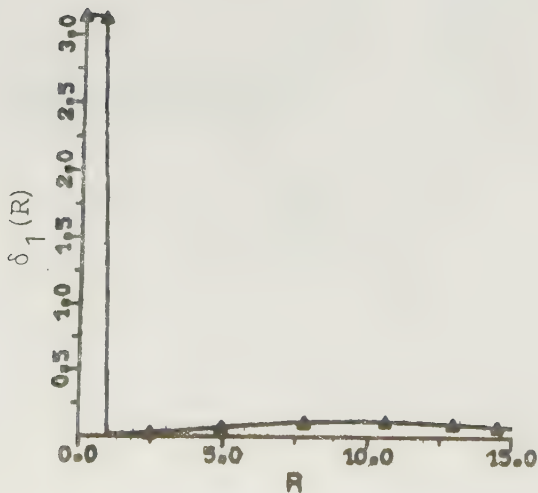


Abb. 48: Modellstreuphase
(HWPR, VS2, $k = .25$)

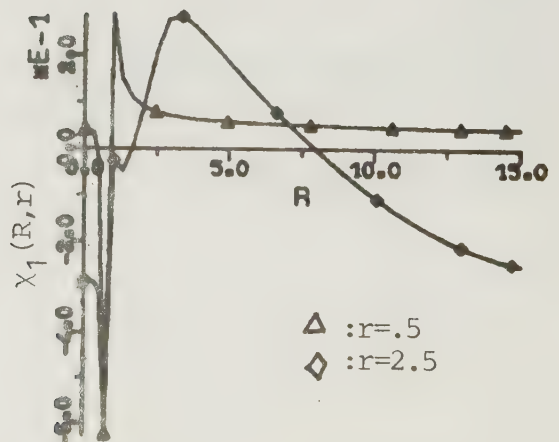


Abb. 49: Modellfunktionen
(HWPR, VS2, $k = .25$)

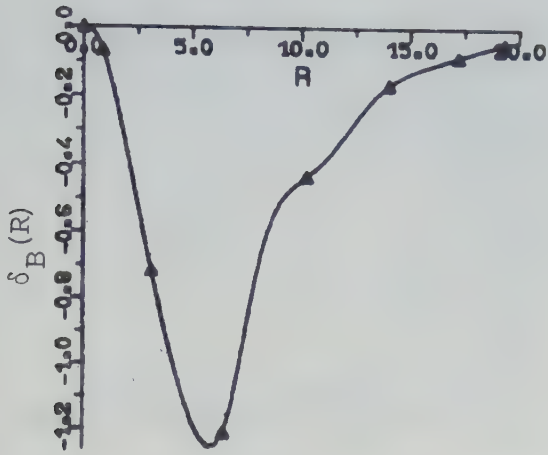


Abb. 50: Modellstreuphase
(HWBR, VB1, $k = .5$)

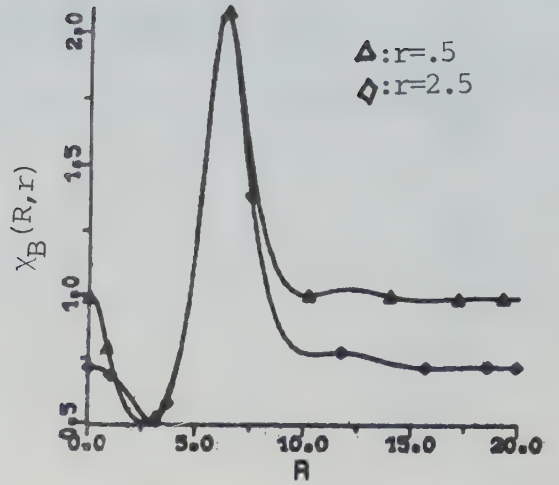


Abb. 51: Modellfunktionen
(HWBR, VB1, $k = .5$)

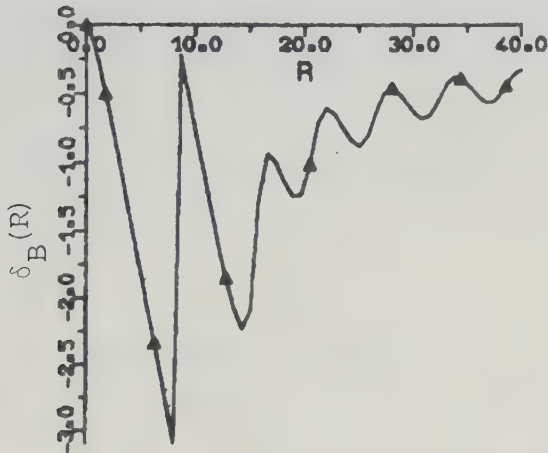


Abb. 52: Modellstreuphase
(HWBR, VB3, $k = .5$)

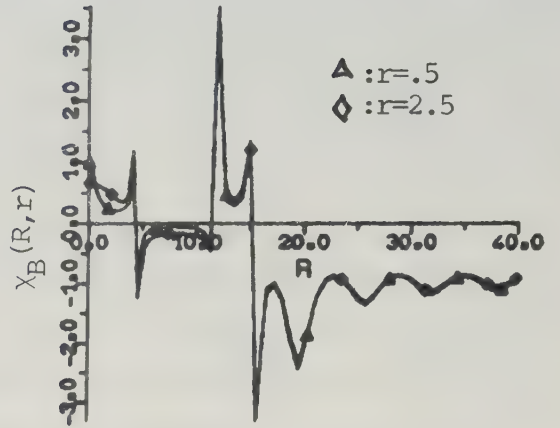


Abb. 53: Modellfunktionen
(HWBR, VB3, $k = .5$)

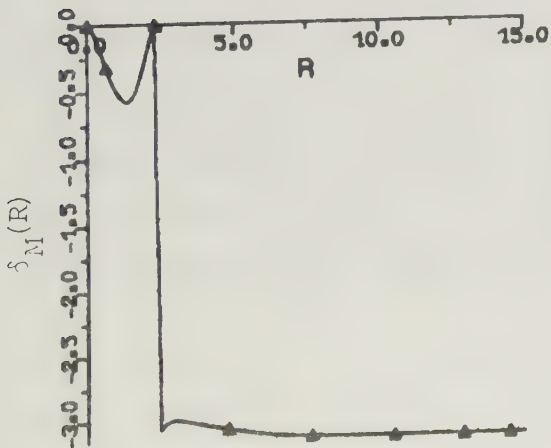


Abb. 54: Modellstreuphase
(HWMOR, VM1, $k = 1.$)

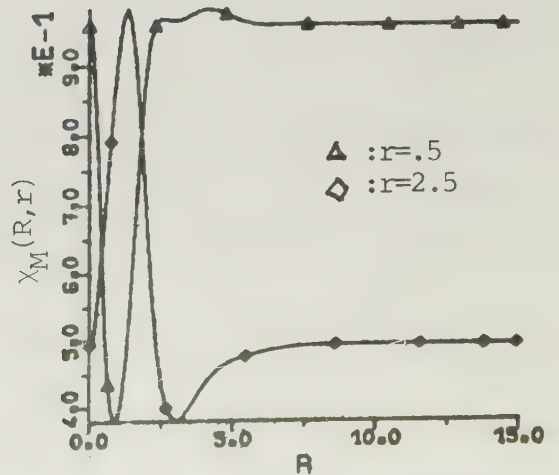


Abb. 55: Modellfunktionen
(HWMOR, VM1, $k = 1.$)

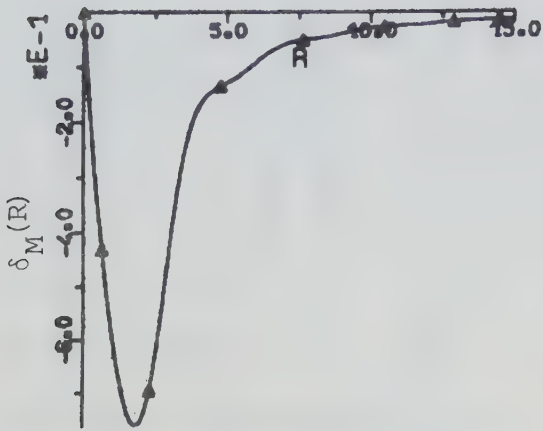


Abb. 56: Modellstreuphase
(HWMOR, VM2, $k = 1.$)

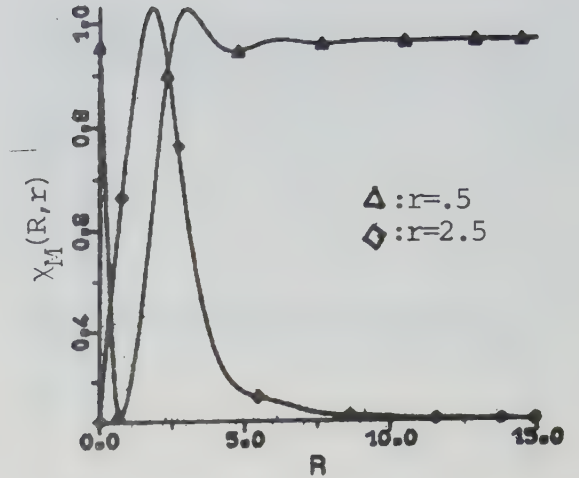


Abb. 57: Modellfunktionen
(HWMOR, VM2, $k = 1.$)

3.2.4 Diskretisierung der HWG

Die HWGen (3.12) und (3.19) wurden mittels Quadraturformeln gelöst. Da die GC R i. a. auf dem Intervall $[0, \infty]$ definiert ist, wurde R auf eine Variable y abgebildet, die im Intervall $[0, 1]$ liegt. Dies geschah durch eine hyperbolische Transformation (HYP) der Form

$$y = \frac{R}{1+R}$$

Bei numerischen Rechnungen war es nicht immer günstig, $R_{\max} = \infty$ zu setzen. Dies hängt zum einen vom untersuchten Potential und zum andern vom Modellpotential ab. Falls $R_{\max}$ hinreichend klein ist, kann man anstelle der Transformation HYP eine einfache Skalierung der Form (SCAL):

$$y = \frac{R}{R_{\max}}$$

wählen.

3.2.4.1 Numerische Integrationsmethoden

Die einfachste angewandte Quadraturformel war die summierte Simpson-Formel [AS 72] (SIM):

$$\int_{x_0}^{x_{2n}} f(x) dx = \frac{h}{3} \{ f(x_0) + 4 [f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{2n-1})] \\ + 2 [f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{2n-2})] + f(x_{2n}) \}$$

mit $h = (x_{2n} - x_0)/N$, $N = 2n$ ist die Anzahl der Stützstellen. Außerdem wurde eine Gauß-Legendre-Quadratur für die Integrale über y verwendet, die aus HYP oder SCAL folgen. Die Quadraturformel lautet [AS 72]:

$$\int_a^b f(y) dy = \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^N w_i f(y_i)$$

mit

$$y_i = \frac{b-a}{2} x_i + \frac{b+a}{2}$$

x_i sind die Stützstellen der Gauß-Legendre-Quadratur im Intervall $[-1,1]$ und w_i die zugehörigen Gewichte.

Wie zu erwarten, hing die Qualität der Lösung der HWG von der Anzahl N der Stützstellen der Quadraturformel ab. Die Schwierigkeit der Diskretisierung bestand darin, daß eine zu geringe Zahl von Stützstellen das Integral nicht hinreichend approximiert, die Lösung der HWG also fehlerhaft ist und damit die resultierende Streuphase η und die WF $u(r)$ schlecht wiedergegeben werden. Andererseits führte eine zu große Stützstellenzahl N auf ein singuläres Gleichungssystem mit verschwindender Determinante.

Die HWG (3.12) hat dann eine bis auf einen multiplikativen Faktor eindeutige Lösung, wenn der Rang der Matrix des Gleichungssystems gerade $(N - 1)$ ist. In allen anderen Fällen muß der Rang

gleich N sein. Es zeigte sich jedoch, daß nur solche Matrizen brauchbare Ergebnisse liefern, die fast singulär sind, also zu einem sehr schlecht konditionierten Gleichungssystem gehören.

Die beiden gewählten Quadraturformeln liefern im Zusammenhang mit den Transformationen HYP und SCAL drei verschiedene Stützstellenverteilungen. Die Simpson-Formel liefert äquidistante Stützstellen, die skalierten Gauß-Legendre-Stützstellen sind auf dem Integrationsintervall etwa gleichverteilt, die HYP-transformierten Gauß-Legendre-Stützstellen sind am Anfang des Integrationsbereichs konzentriert und liegen für große y immer weiter auseinander.

Es wird sich herausstellen, daß die beste Näherung der Lösung $c(R)$ der HWG genau die ist, die für alle drei Integrationsmethoden fast gleiche numerische Werte hat, d. h. die beste Approximation für $c(R)$ ist von einer speziellen Wahl der Stützstellen unabhängig. Lediglich die notwendige Anzahl der Stützstellen variiert für die einzelnen numerischen Integrationsmethoden.

3.2.4.2 Numerische Lösungsverfahren

Die HWGen (3.12) und (3.19) wurden durch ein lineares Gleichungssystem approximiert, indem die Integration über R durch eine der oben beschriebenen Quadraturformeln ersetzt wird und für R' die gleichen Stützstellen wie für die Variable R genommen werden. Dies führt bei Vernachlässigung des Fehlers der Quadraturformel auf die Gleichungssysteme

$$\sum_{i=1}^N A(z_j, z_i) \mathcal{C}(z_i) = 0 \quad j = 1, \dots, N \quad (3.26)$$

oder

$$\sum_{i=1}^N A(z_j, z_i) \mathcal{C}(z_i) = C g(z_j) \quad j = 1, \dots, N \quad (3.27)$$

Die Komponenten des Lösungsvektors $\underline{\mathcal{C}} = \{\mathcal{C}(z_i)\}$ lauten

$$\mathcal{C}(z_i) = \alpha c(z_i)$$

wo $\alpha = h/3$ bei der Simpson-Integration und

$$\alpha = (y_{\max} - y_{\min})/2$$

bei der Gauß-Legendre-Integration ist. Der Vektor

$$\underline{c} = \{c(z_i)\} = \frac{1}{\alpha} \underline{\tilde{c}}$$

ist die numerische Approximation der Gewichtsfunktion $c(R)$.

Die Matrix A lautet bei Simpson-Integration

$$A(z_j, z_i) = w_i K(R_j, R_i)$$

und beim Gauß-Legendre-Verfahren

$$A(z_j, z_i) = w_i K(y(R_j), y(R_i)) \left. \frac{dR}{dy} \right|_{y=y(R_i)}$$

Die w_i sind die Gewichte der Quadraturformel. Die Koordinate z kann als neue GC verstanden werden.

Die Lösungen von (3.26) bzw. (3.27) müssen die Nebenbedingungen (3.14) bzw. (3.21) in der Form

$$\sum_{i=1}^N \hat{c}(z_i) = 1 \quad (3.28)$$

bzw.

$$\sum_{i=1}^N \hat{c}(z_i) = 1 + C \quad (3.29)$$

erfüllen, wo

$$\hat{c}(z_i) = \tilde{c}(z_i) w_i \left. \frac{dR}{dy} \right|_{y=y(R_i)}$$

ist. Das homogene Gleichungssystem (3.26) mit der Nebenbedingung (3.28) wurde auf zweifache Weise gelöst:

LLSQ: LLSQ ist ein "least-square"-Verfahren zur Lösung eines überbestimmten Gleichungssystems. In diesem Fall wurde

das aus $(N + 1)$ Zeilen und N Spalten bestehende System

$$\sum_{i=1}^N A(z_j, z_i) \tilde{c}(z_i) = 0 \quad j = 1, \dots, N$$

$$\sum_{i=1}^N \hat{c}(z_i) = 1$$

näherungsweise gelöst. Die Lösung dieses Gleichungssystems ist eindeutig, wenn der Rang der $(N + 1) \times N$ -Matrix gleich N ist. Diese Lösung erfüllt automatisch die Bedingung (3.28).

MFGR: MFGR ist ein Gauß-Eliminationsverfahren zur Lösung eines homogenen Gleichungssystems mit singulärer Matrix. Hier wurde eine Lösung des Gleichungssystems (3.26) berechnet, dessen Matrix A gerade den Rang $(N - 1)$ hat. Die Lösung $\tilde{c}$ dieses Systems ist bis auf einen multiplikativen Faktor eindeutig. Dieser Faktor wurde über die "Normierung" (3.28) bestimmt.

Das inhomogene Gleichungssystem (3.27) wurde folgendermaßen gelöst:

GELG: GELG ist ein Gauß-Eliminationsverfahren zur Lösung eines inhomogenen Gleichungssystems. Zunächst wurde (3.27), das ein $(N \times N)$ -Gleichungssystem mit $N+1$ Unbekannten $\tilde{c}(z_i)$, $i = 1, \dots, N$ und C ist, durch Division durch die Konstante C auf die Form

$$\sum_{i=1}^N A(z_j, z_i) \bar{c}(z_i) = g(z_j) \quad j = 1, \dots, N$$

gebracht mit

$$\bar{c}(z_i) = \frac{1}{C} \tilde{c}(z_i)$$

Die Konstante C ergibt sich mittels (3.29) aus der Lösung $\bar{c}$ des obigen Gleichungssystems als:

$$C = \left[\sum_{i=1}^N \bar{c}(z_i) w_i \frac{dR}{dy} \bigg|_{y=y(R_i)} - 1 \right]^{-1/2}$$

Diese drei Lösungsverfahren liefern eindeutige Lösungen der entsprechenden Gleichungssysteme. In jedem Fall erhält man eine Lösung, die bestenfalls die Gewichtsfunktion $c(R)$ approximiert. Da das Verfahren zur Bestimmung der numerischen Lösung $\tilde{c}$ jeweils verschieden ist, kann man keine identischen Lösungen erwarten.

3.3 Zusammenhang der HWG mit dem Hulthén-Kohn'schen Variationsprinzip

Die inhomogene HWG (3.19) erfüllt im Gegensatz zur homogenen HWG (3.12) das Hulthén-Kohn'sche-Variationsprinzip. Dieses Variationsprinzip bestimmt Lösungen der radialen SGL (3.9) als stationäre Werte des Funktional [Jo 79]:

$$J = I + \frac{\lambda}{k}, \quad \lambda = \operatorname{tgn}$$

wo das Funktional I definiert ist als

$$I = \int_0^{\infty} dr \, u(r) L[u(r)]$$

mit dem Differentialoperator

$$L[u(r)] = \left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r) - \frac{1(1+1)}{r^2} \right) u(r)$$

Die Streu-WF $u(r)$ genüge der asymptotischen Randbedingung

$$u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{j}(kr) - \operatorname{tgn} \hat{n}(kr)$$

Als Test-WF des Funktional I wird der HW-Ansatz (3.18) gewählt:

$$u(r) = \int_{\Omega} dR \, c(R) \chi(R, r) - C \hat{j}(kr)$$

Damit lautet I:

$$I = \int dR' \int dR c(R') c(R) \int dr \chi(R', r) L[\chi(R, r)] - \\ C \int dR' c(R') \int dr \chi(R', r) L[\hat{j}(kr)] - \\ C' \int dR c(R) \int dr \hat{j}(kr) L[\chi(R, r)] + C'C \int dr \hat{j}(kr) L[\hat{j}(kr)]$$

Stationäre Werte von J liefert die Gleichung

$$\delta J = \delta I + \frac{1}{k} \delta \lambda = 0 \quad (3.30)$$

Mit den Größen

$$K(R', R) = \int dr \chi(R', r) [v(R, r) - V(r)] \chi(R, r) \\ g(R) = - \int dr \chi(R, r) V(r) \hat{j}(kr) \\ \lambda_{BN} = -k \int dr \hat{j}(kr) V(r) \hat{j}(kr) \\ \text{tg } \delta(R) = -k \int dr \hat{j}(kr) v(R, r) \chi(R, r)$$

(λ_{BN} ist die Born'sche Näherung für $\lambda = \text{tg } \eta$ und $\text{tg } \delta(R)$ ist die Integraldarstellung der Modellstreuphase $\delta(R)$ [Jo 79, S. 79]) lautet I:

$$I = \int dR' \int dR c(R') c(R) K(R', R) - C \int dR' c(R') g(R') - \\ C' \int dR c(R) g(R) + C' \int dR c(R) \frac{\text{tg } \delta(R)}{k} + C'C \frac{\lambda_{BN}}{k}$$

Setzt man die Nebenbedingung (3.18) in der Form

$$C = \int dR c(R) - 1 \quad (3.31)$$

in den Ausdruck für I ein, so lautet dieses Funktional:

$$I = \int dR \int dR' c(R') c(R) \{K(R', R) - g(R') - g(R) + \frac{1}{k} \text{tg } \delta(R) + \\ \frac{\lambda_{BN}}{k}\} + \int dR' c(R') \{g(R') - \frac{\lambda_{BN}}{k}\} + \\ \int dR c(R) \{g(R) - \frac{1}{k} \text{tg } \delta(R) - \frac{\lambda_{BN}}{k}\} + \frac{\lambda_{BN}}{k}$$

Die Streuphase η der Test-WF $u(r)$ ist entsprechend (3.15) als

$$\lambda = \operatorname{tg} \eta = \int dR \, c(R) \operatorname{tg} \delta(R)$$

darstellbar. Die Variation (3.30) von J ergibt

$$\delta I = - \frac{1}{k} \delta \lambda = - \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R) \delta c(R) = \frac{\partial I}{\partial c} \delta c(R)$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial I}{\partial c} = - \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R)$$

oder explizit bei Berücksichtigung der Anhermitizität des Kerns $K(R', R)$:

$$K(R', R) - K(R, R') = \frac{1}{k} [\operatorname{tg} \delta(R) - \operatorname{tg} \delta(R')]$$

die Gleichung:

$$\begin{aligned} & 2 \int dR \, c(R) \{K(R', R) - g(R') - g(R) + \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R) + \frac{\lambda_{BN}}{k}\} + \\ & 2 \{g(R') - \frac{\lambda_{BN}}{k}\} - \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R) = - \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R) \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} \int dR \, c(R) \{K(R', R) - g(R') - g(R) + \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R) + \frac{\lambda_{BN}}{k}\} = \\ = \frac{\lambda_{BN}}{k} - g(R') \end{aligned} \quad (3.32)$$

Das Hulthén-Kohn'sche Variationsprinzip fordert [De 63, S. 53ff] außerdem, daß $I = 0$ ist. Daraus folgt durch Vergleich mit (3.32):

$$\int dR \, c(R) \{g(R) - \frac{\lambda_{BN}}{k} - \frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta(R)\} = - \frac{\lambda_{BN}}{k} \quad (3.33)$$

(3.33) liefert bei Berücksichtigung von (3.31) die Integraldarstellung der Streuphase η in der Form

$$\operatorname{tg} \eta = \lambda = k \int dR \, c(R) g(R) - C \lambda_{BN} \quad (3.34)$$

Setzt man (3.33) in (3.32) ein, so erhält man die HWG (3.19):

$$\int dR \, c(R) \, K(R', R) = C \, g(R')$$

Im Gegensatz zum HW-Ansatz (3.18), der als Testfunktion im Funktional J die HWG (3.19) liefert, führt der Ansatz (3.11) für die WF $u(r)$ nicht auf die HWG (3.12) durch Variation des entsprechenden Funktionals J.

Setzt man (3.11) als Testfunktion in das Funktional I ein, so erhält man den Ausdruck

$$I = \int dR' \int dR \, c(R') \, c(R) \, K(R', R)$$

Die Variation von I liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial c} &= \int dR \, c(R) \, K(R', R) + \int dR' \, c(R') \, K(R', R) \\ &= 2 \int dR \, c(R) \, K(R', R) + \frac{1}{k} \int dR' \, c(R') \left[\operatorname{tg} \delta(R) - \operatorname{tg} \delta(R') \right] \end{aligned}$$

weil $K(R', R)$ unsymmetrisch ist. Berücksichtigt man die Nebenbedingung (3.14) und die Darstellung von η (3.15), so erhält man aus dem Variationsprinzip anstelle von (3.12) die inhomogene IGL:

$$\int dR \, c(R) \, K(R', R) = \frac{\lambda}{2k}$$

Diese Gleichung, die die Unbekannten $c(R)$ und λ enthält, wäre zusammen mit (3.15), wo

$$\lambda = \int dR \, c(R) \, \operatorname{tg} \delta(R)$$

ist, eindeutig lösbar.

4. Numerische Lösung der HWG

4.1 Zur Diskretisierung einer inhomogenen FIGl 1. Art

Die HWG (3.19) ist eine inhomogene FIGl 1. Art mit einem beschränkten oder kompakten Integraloperator K , der einen BR E auf einen anderen BR E' abbildet. Der zu K inverse Operator K^{-1} existiert, ist aber nicht beschränkt. Dies ist die Ursache dafür, daß die HWG (3.19) ein inkorrekt gestelltes Problem ist. Korrekt gestellt im Sinne von Tihonov [Ti 63] ist ein Problem dann, wenn

a) zu jeder Funktion $g(x)$ der IGl

$$\int dy K(x,y) f(y) = g(x) \quad (4.1)$$

eine Lösung $f(y)$ existiert,

b) die Lösung $f(y)$ für gegebenes $g(x)$ eindeutig ist,

c) die Abhängigkeit der Lösung $f(y)$ von der rechten Seite $g(x)$ stetig in der Metrik von $f(y)$ und $g(x)$ ist.

Aus allem bisher Gesagten geht hervor, daß diese drei Kriterien i. a. für FIGlen 1. Art nicht oder nur teilweise erfüllt sind. Eine Folge davon ist, daß es viele Lösungen der IGl gibt, die eine andere IGl exakt erfüllen, die sich nur geringfügig von der ursprünglichen unterscheidet. Falls der Integraloperator K kompakt ist, enthält sein Spektrum den Eigenwert Null und abzählbar viele sehr kleine Eigenwerte. Die entsprechenden Funktionen bewirken die starken Oszillationen der Lösung $f(y)$, die numerisch nur selten korrekt zu berechnen ist.

Die Eigenschaften des Operators K erzeugen bei der Diskretisierung der IGl ein Gleichungssystem

$$A \underline{x} = \underline{b} \quad (4.2)$$

mit einer fast singulären Matrix A . Die Lösung dieses Gleichungssystems

chungssystems wird durch den Umstand erschwert, daß eine genaue Approximation des Kerns $K(x,y)$ durch die Matrix A , d. h. eine große Zahl N von Stützstellen, die numerischen Rechnungen instabil macht. Denn mit wachsendem N wird A immer stärker fast singulär und um so wahrscheinlicher sind divergente Oszillationen in $\underline{x}$. Man stellt sogar fest, daß das Gleichungssystem (4.2) auch dann schlecht konditioniert sein kann, wenn die Lösung $f(y)$ der IGL (4.1) existiert und eindeutig ist [IGL].

In dieser Arbeit wurde die diskretisierte HWG (3.27) mit einem Gauß-Eliminationsverfahren näherungsweise gelöst. Dieses Verfahren ersetzt die Lösung von (4.1) durch die Lösung der Gleichung [Gl 75]

$$(A + \delta A) \underline{x} = \underline{b} \quad (4.3)$$

wo δA eine kleine Variation der Matrix A bezeichnet. Diese Gleichung ist äquivalent zur Gleichung

$$A \underline{x} = \underline{b} + \underline{\epsilon}$$

in der $\underline{\epsilon}$ ein kleiner Fehler ist. Man kann zeigen, daß die Ungenauigkeit der Lösung $\underline{x}$ von den Elementen der zu A inversen Matrix A^{-1} abhängt [Ph 62]. Sei

$$A^{-1} = (\alpha_{ij})$$

so folgt für die Komponenten x_i von $\underline{x}$ die Beziehung

$$\frac{\partial x_i}{\partial \epsilon_j} = \alpha_{ij} \quad (4.4)$$

Je größer also die Elemente α_{ij} der Matrix A^{-1} sind, desto größer ist der Fehler, der bei numerischen Rechnungen in der Lösung $\underline{x}$ der Gleichung (4.2) auftreten kann. (4.4) kann demnach als ein Maß dafür dienen, wie schlecht konditioniert das Gleichungssystem (4.2) ist.

Ein weiteres Kriterium dafür, ob ein Gleichungssystem schlecht

konditioniert ist, ist die Konditionszahl $\text{cond}(A)$ [FM 71]. Das Gauß'sche Eliminationsverfahren produziert einen Fehler δA in den Matrixelementen von A in der Gleichung (4.2). Damit ist ein Fehler $\delta \underline{x}$ der Lösung $\underline{x}$ dieser Gleichung verbunden, den man als

$$\delta \underline{x} = \left[(A + \delta A)^{-1} - A^{-1} \right] \underline{b} = -A^{-1} (\delta A) (\underline{x} + \delta \underline{x})$$

berechnet. Betrachtet man die Normen dieser Größen, so erhält man die Beziehung

$$\frac{||\delta \underline{x}||}{||\underline{x} + \delta \underline{x}||} \leq \text{cond}(A) \frac{||\delta A||}{||A||}$$

Die Ungenauigkeit in $\underline{x}$ wird also durch die mit $\text{cond}(A)$ multiplizierte relative Ungenauigkeit von A beschränkt. Die Konditionszahl $\text{cond}(A)$ ist der Ausdruck

$$\text{cond}(A) = ||A|| ||A^{-1}|| \quad (4.5)$$

$\text{cond}(A)$ ist ein Maß für die "Gutartigkeit" des Gleichungssystems (4.2). Ist $\text{cond}(A)$ relativ klein, so heißt das Gleichungssystem gut konditioniert. Sonst heißt es schlecht konditioniert. Man kann allerdings keine exakte Grenze zwischen gut und schlecht konditionierten Gleichungssystemen angeben.

Es wird sich bei den untersuchten Problemen herausstellen, daß man mit Hilfe von (4.4) und (4.5) keine Aussagen darüber machen kann, ob die approximative, numerische Lösung $\underline{c}$ der Gewichtsfunktion $c(R)$ eine glatte Funktion darstellt oder ob sie starke Oszillationen zeigt.

4.2 Die diskretisierte HWG als schlecht konditioniertes Gleichungssystem

[HS 72] entwickelten eine FIGl-Methode für die Streuphase, die die Lipmann-Schwinger-Gleichung auf ein lineares Gleichungssystem transformiert, das man als diskretisierte FIGl 1. Art betrachten kann. Sie erwähnen, daß der Lösungsvektor des

Gleichungssystems große Schwankungen zeigt, die Streuphase jedoch bemerkenswert stabil ist. Dies liegt daran, daß zur Berechnung der Streuphase über die Komponenten des Lösungsvektors gemittelt wird.

Die gleichen Erfahrungen macht man mit der Lösung $\underline{c}$ der Gleichungen (3.26) und (3.27). Die numerische Näherung des Ausdrucks (3.15) für die Streuphase

$$\lambda_{HW} = \operatorname{tg} \eta_{HW} = \frac{N}{\sum_{i=1}^N} \hat{c}(z_i) \operatorname{tg} \delta(z_i) \quad (4.6)$$

ist bei einem günstig gewählten Definitionsbereich Ω der GC R ziemlich unabhängig vom Integrationsverfahren. Auch die numerisch berechnete Streu-WF

$$u_{HW}(r) = \sum_{i=1}^N \hat{c}(z_i) \chi(z_i, r) - C \hat{j}(kr) \quad (4.7)$$

stimmt recht gut mit der exakten Streulösung $u(r)$ in (3.11) überein. Dabei wird allerdings vorausgesetzt, daß die Parameter Ω und N und das Modellpotential so gewählt sind, daß die HWG (3.19) numerisch hinreichend gut genähert ist.

Die Lösungen $\underline{\tilde{c}}$ der Gleichung (3.27) wurden dann als brauchbar akzeptiert, wenn sie folgende Bedingungen erfüllten:

1. Der Lösungsvektor $\underline{\tilde{c}}$ des Gauß'schen Eliminationsverfahrens muß das Gleichungssystem (3.27) bis auf einen kleinen Fehler $\underline{\epsilon}$, der durch Rundungsfehler auftritt, erfüllen, d. h.

$$\sum_{i=1}^N \left| A(z_j, z_i) \tilde{c}(z_i) - C g(z_j) \right| < \epsilon_j \quad j = 1, \dots, N$$

wo $\epsilon_j < 10^{-8}$ gefordert wird.

2. Die "Normierung" (3.28) muß bis auf einen Fehler $\epsilon < 10^{-8}$ erfüllt sein.

3. Der Ausdruck λ_{HW} in (4.6) muß mit der Integraldarstellung der Streuphase (3.34) in der Form

$$\lambda_{HW}^I = k \sum_{i=1}^N \hat{c}(z_i) g(z_i) - C \lambda_{BN}$$

in den ersten fünf Dezimalstellen übereinstimmen. λ_{HW}^I ist ein Maß für die Güte der WF $u_{HW}(r)$.

4. Die dem Lösungsvektor $\underline{c}$ entsprechende Funktion $c(R)$ muß eine Stammfunktion $C(R)$ besitzen, die zu $V^O[\Omega]$ gehört.

Die gleichen Bedingungen muß die Lösung $\underline{c}$ des Gleichungssystems (3.26) erfüllen, nur mit $C = 0$. Es stellt sich heraus, daß die Lösungsverfahren LLSQ und MFGR mit größeren Rundungsfehlern arbeiten als das Verfahren GELG des inhomogenen Systems. Außerdem zeigt die Lösung von (3.26) stärkere Oszillationen am Anfang und Ende des Integrationsbereichs Ω . Daher ist für numerische Rechnungen das inhomogene System (3.27) vorzuziehen, auch wenn (3.26) brauchbare Ergebnisse für η_{HW} und $u_{HW}(r)$ liefert.

Die folgende Tabelle veranschaulicht, in welchem hohem Maß die Gleichungssysteme (3.27) und (3.26) schlecht konditioniert sind. Für alle untersuchten Modellprobleme liegen die typischen Konditionszahlen für alle Modellpotentiale über 10^{10} und die Maximalwerte der Elemente der inversen Matrix A^{-1} über 10^6 . Dies begründet die Vermutung, daß der Lösungsvektor $\underline{c}$ allenfalls zufällig mit der Gewichtsfunktion $c(R)$ zusammenfällt.

Tab. 2 verdeutlicht, daß die Größe der Ungenauigkeit der Lösung $\underline{c}$ aufgrund der Gleichung (4.4) von der Wahl des Modellpotentials beeinflusst wird. Es zeigt sich, daß die Modellpotentiale mit einer längeren Reichweite als der des untersuchten Potentials $V(r)$ normalerweise die numerisch stabileren Gleichungssysteme liefern. Weiterhin bestätigt sich die Ähnlichkeit der beiden Modellpotentiale VM1 und VM2.

Die Größe der Konditionszahlen $\text{cond}(A)$ und der Matrixelemente α_{ij} der zu A inversen Matrix A^{-1} legten es nahe, alle Rechnungen doppeltgenau auszuführen.

Tab. 2:

	$v(R,r)$	$\text{cond}(A)$	$ \alpha_{ij} $
HWSR	VS1	10^{14}	$10^{-1} - 10^{12}$
HWSR	VS2	10^{15}	$10^{-3} - 10^{10}$
HWPR	VS1	10^{13}	$10^1 - 10^{13}$
HWPR	VS2	10^{10}	$10^{-2} - 10^9$
HWBR	VB1	10^{14}	$10^2 - 10^{12}$
HWBR	VB3	10^{12}	$10^{-4} - 10^6$
HWMOR	VM1	10^{14}	$10^{-2} - 10^{11}$
HWMOR	VM2	10^{14}	$10^{-2} - 10^{12}$

4.2.1 Streuung am kugelsymmetrischen Potentialtopf

Die SGL für die Streuung am kugelsymmetrischen Potentialtopf mit der Breite R_0 und der Tiefe $-V_0$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0$$

mit

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R_0 \\ 0 & r > R_0 \end{cases}$$

besitzt eine analytische Lösung für jede Partialwelle. Dieses einfache Streuproblem eignet sich besonders, um die Qualität der numerischen Lösung der HWG zu beurteilen.

Wählt man als erzeugende Funktionen $\chi_l(R,r)$ des HW-Ansatzes

$$u_l(r) = \chi_l(R_0, r) = \int_{\Omega} dR \, c_l(R) \, \chi_l(R, r) \quad R_0 \in \Omega$$

Streulösungen von Potentialtöpfen der Breite R und der Tiefe $-V_0$, so lautet die Gewichtsfunktion $c_1(R) = \delta(R - R_0)$. Die numerische Reproduktion dieser Lösung sollte einige Schwierigkeiten bereiten. Gerade deshalb erscheint dieses Modellproblem als sinnvolle Testmöglichkeit für die algebraische Lösung der HWG. Um die Instabilität der numerischen Berechnung etwas zu mildern, wurde die Tiefe $-V_0$ der Modellpotentiale

$$v(R,r) = \begin{cases} -V_0 & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

fast gleich $-V_0$ gesetzt. Als einfachstes Problem wurde die s-Wellen-Streuung untersucht. Der HW-Ansatz lautet hier

$$u_0(r) = \chi_0(R_0, r) = \int_{\Omega} dR c_0(R) \chi_0(R, r) = C_0 \hat{j}_0(kr)$$

Die Wahl des Integrationsbereichs Ω erwies sich in diesem Spezialfall als besonders schwierig. Um überhaupt brauchbare Ergebnisse zu erzielen, mußte - wie zu erwarten - $R_0 \in \Omega$ sein. Der Maximalwert $R_{\max}$ der GC R durfte nur geringfügig größer als R_0 sein, während die untere Grenze $R_{\min}$ des Integrationsintervalls keine drastischen Auswirkungen hatte. Da die genäherten Streuphasen η_{HW} nur grob richtig sind, ist die folgende Diskussion qualitativ zu verstehen, wenn sie auch direkt auf solche numerischen Lösungen der HWG übertragbar ist, die die exakte Streuphase reproduzieren.

In den folgenden Rechnungen wurden die Parameter

$$V_0 = -0.8549, \quad R_0 = 2.1, \quad v_0 = -0.85483, \quad \Omega = [0.; 2.15]$$

gewählt. Die Abb. 58 - 63 zeigen die Lösungsfunktionen $c(R)$ ¹ der homogenen und inhomogenen HWG für drei verschiedene Stütz-

¹ Im folgenden wird der Lösungsvektor $\underline{c}$ mit der Gewichtsfunktion $c(R)$ identifiziert.

stellenzahlen. In allen Fällen ist $c(R)$ eine glatte Funktion mit einem ausgeprägten Maximum bei $R = R_0$. Sie repräsentiert die zu erwartende Gewichtsfunktion. Zusätzlich tritt jedoch bei $R = 0$ ein Wert für $c(R)$ auf, der als Maß für den numerischen Fehler angesehen werden kann. Es zeigt sich, daß bei fester Stützstellenzahl der Fehler der homogenen Gleichung größer als der der inhomogenen Gleichung ist. Dies ist auf die Qualität des Lösungsverfahrens zurückzuführen. Während das Verhältnis $c(R=0)/c(R=R_0)$ im inhomogenen Fall bei .2 liegt, ist es im homogenen Fall etwa .5. Verbesserte Rechnungen mit $R_{\max} = 2.11$ liefern die Werte .03 im inhomogenen und .06 im homogenen Fall. Wählt man $R_{\min} > 0$, so erscheint der Fehler in der Nähe von $R_{\min}$. Weiterhin zeigen die Abb. 58 - 63 eine starke Abhängigkeit der Lösung $c(R)$ von der Stützstellenzahl N , auch wenn der qualitative Verlauf der Funktion $c(R)$ ähnlich ist. Dies ist auf die schlechte Konditioniertheit der Gleichungssysteme zurückzuführen.

In den Abb. 58 - 63 wurde $k = .25$ und $R_{\max} = 2.15$ gesetzt. Die zu erwartende exakte Streuphase beträgt $\eta = 2.110$. Sie ist um so eher zu reproduzieren, je näher $R_{\max}$ bei R_0 liegt. Man stellt fest, daß der numerische Fehler für $N = 64$ minimal wird, sowohl für $R_{\max} = 2.15$ wie für $R_{\max} = 2.11$. Dies ist so zu interpretieren, daß die Approximation des Integrals mit $N = 32$ unzureichend ist, für $N = 96$ aber das Gleichungssystem sehr schlecht konditioniert ist. Bei der Stützstellenzahl $N = 64$ werden beide Schwierigkeiten günstig kompensiert.

Die folgende Tabelle (Tab. 3) soll diese Zusammenhänge verdeutlichen.

Tab. 3:

N	$R_{\max}$	Methode	η_{HW}
32	2.15	GELG	2.1201
32	2.15	LLSQ	2.1076
32	2.11	GELG	2.1145
32	2.11	LLSQ	2.1090
64	2.15	GELG	2.1191
64	2.15	LLSQ	2.1089
64	2.11	GELG	2.1116
64	2.11	LLSQ	2.1108
96	2.15	GELG	2.1211
96	2.15	LLSQ	2.1193
96	2.11	GELG	2.1142
96	2.11	LLSQ	2.1104

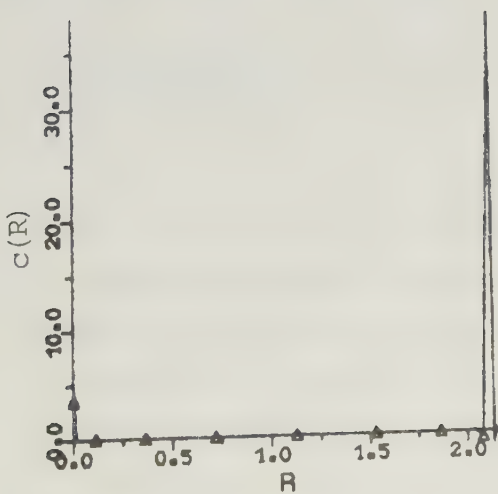


Abb. 58: Gewichtsfunktion
(GELG, $N = 32$, $k = .25$)

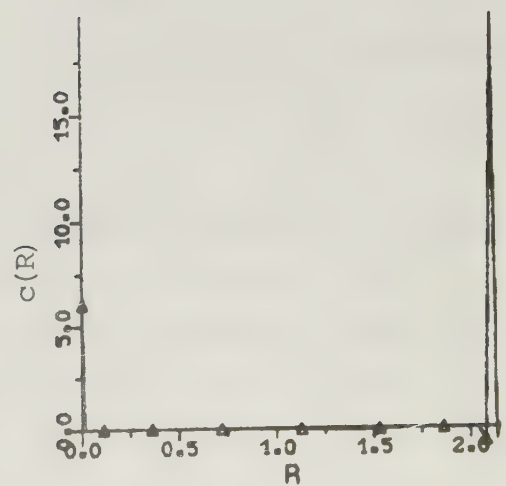


Abb. 59: Gewichtsfunktion
(LLSQ, $N = 32$, $k = .25$)

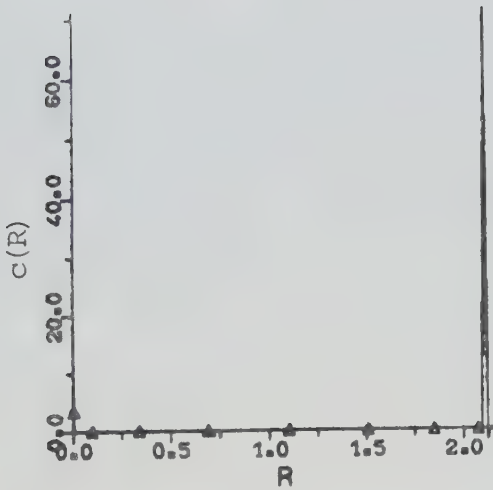


Abb. 60: Gewichtsfunktion
(GELG, $N = 64$, $k = .25$)

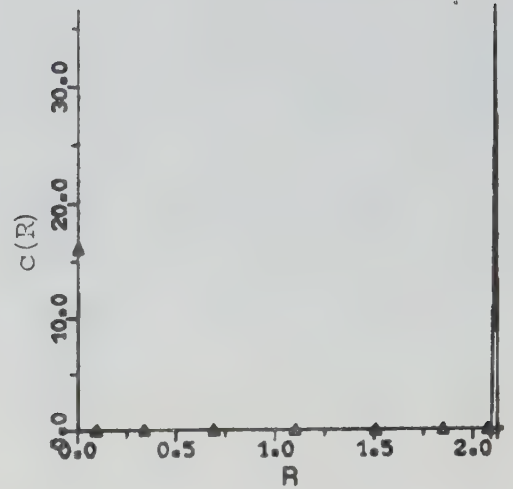


Abb. 61: Gewichtsfunktion
(LLSQ, $N = 64$, $k = .25$)

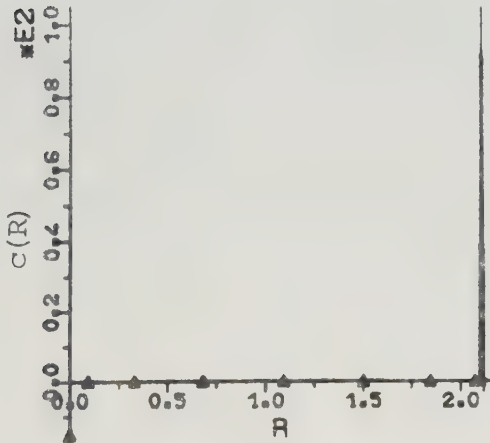


Abb. 62: Gewichtsfunktion
(GELG, $N = 96$, $k = .25$)

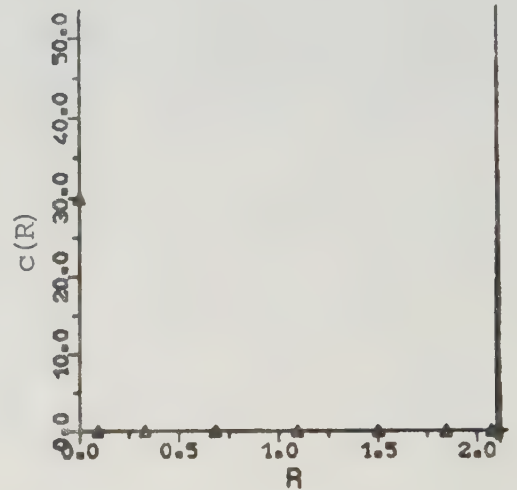


Abb. 63: Gewichtsfunktion
(LLSQ, $N = 96$, $k = .25$)

4.2.2 Die Lösung der diskretisierten HWG

Der vorige Abschnitt hat deutlich gemacht, wie kompliziert eine numerische Approximation der HWG ist. Die Ergebnisse für die untersuchten Zentralpotentiale, die im folgenden dargestellt werden, unterstreichen die numerische Problematik. Man stellt fest, daß die GC-Funktion $c(R)$ und die mit ihr verknüpften Funktionen $C(R)$, $C_1(R)$ und $C_2(R)$ nur in seltenen Fällen glatte

Funktionen sind, im Normalfall jedoch Resultate numerischer Ungenauigkeiten sein dürften. Die Abb. zeigen eine Korrelation zwischen der Struktur der Matrix $A = (A(z_j, z_i))$ und dem Verhalten der Lösung $c(R)$. Diese ist immer dann besonders unanschaulich und stark oszillierend, wenn A entweder sehr glatt ist oder die Matrixelemente $A(z_j, z_i)$ große numerische Unterschiede aufweisen. Nur in besonders günstigen Fällen, wo A zwar eine starke Struktur besitzt, ihre Matrixelemente sich jedoch nicht drastisch voneinander unterscheiden, erhält man eine anschaulich glatte Lösungsfunktion $c(R)$ mit einem deutlichen Maximum. Entscheidend wird die Matrix A und damit die GC-Funktion $c(R)$ vom Modellpotential geprägt. Leider fehlt eine allgemeingültige Vorschrift dafür, welches Modellpotential zur Beschreibung eines Zentralpotentials gewählt werden muß, damit die Matrix A diejenigen Eigenschaften besitzt, die eine glatte numerische Lösung erlauben.

Die folgenden Abb. zeigen für die einzelnen Modellprobleme jeweils typische Diagonalen von A , die Gewichtsfunktion $c(R)$ und deren Stammfunktion $C(R)$, sowie die Komponenten $C_1(R)$ und $C_2(R)$ der Funktion $C(R)$. In allen Fällen stimmt die Streuphase η_{HW} mit der analytischen Streuphase η gut überein.

1. s-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential

- a) Das Modellpotential VS1 erzeugt eine sehr glatte Matrix A . Daher zeigt die Lösung $c(R)$ am Anfang und Ende des Integrationsintervalls Oszillationen zwischen 10^6 und -10^4 . (Sie konnte nicht in einem Diagramm dargestellt werden.) Dennoch ist ihre Stammfunktion $C(R)$ eine monoton wachsende Funktion (Abb. 64 - 67).

Trotz des unanschaulichen Verhaltens von $c(R)$ stimmt die Streu-WF $u_{HW}(r)$ bis auf minimale Abweichungen mit der analytischen Lösung $u_0(r)$ überein (Abb. 68).

- b) Die zum Modellpotential VS2 gehörige Matrix A ermöglicht eine glatte Lösung $c(R)$ (Abb. 70), deren Maximum in der

Nähe der Modellstreuphase liegt, die der gesuchten Streuphase η_0 entspricht. Die Stammfunktion $C(R)$ kann man mit Einschränkungen als verallgemeinerte Wahrscheinlichkeitsverteilung verstehen, da $C_2(R)$ im Vergleich zu $C_1(R)$ vernachlässigbar ist (Abb. 71 - 73). Die resultierende WF $u_{HW}(r)$ ist beinahe mit der analytischen Streulösung $u_0(r)$ identisch (Abb. 74).

Löst man statt des inhomogenen Gleichungssystems das entsprechende homogene System mit dem Verfahren LLSQ, so treten am Ende des Integrationsintervalls in $c(R)$ starke Oszillationen auf (Abb. 75), die auf Rundungsfehler zurückzuführen sind. Die Stammfunktion $C(R)$ von $c(R)$ gehört zu $V^0[\Omega]$ (Abb. 76 - 78). Die WF $u_{HW}(r)$, die aus der homogenen HWG folgt, stimmt sehr gut mit der WF des inhomogenen Systems überein.

Das Modellpotential VS2 hat zur Beschreibung des attraktiven Exp-Potentials ausgezeichnete Eigenschaften. Die Lösung $c(R)$ zeigt für alle möglichen Stützstellenverteilungen und Lösungsverfahren ein bis auf eine Skalierung gleiches funktionales Verhalten (Abb. 70, 79 - 82).

2. p-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential

Die p-Wellen-Streuung am attraktiven Exp-Potential führt auf erheblich schlechter konditionierte Gleichungssysteme als die s-Wellen-Streuung, da die Matrix A deutlich glatter ist (Abb. 83, 89). Doch bleibt der Unterschied der Lösung $c(R)$ analog zur s-Wellen-Streuung bei den Modellpotentialen VS1 und VS2 bestehen. Für beide Modellpotentiale zeigen die WFen $u_{HW}(r)$ einen qualitativ richtigen Verlauf (Abb. 87, 88) und weichen in ihren Funktionswerten nur geringfügig voneinander ab. Sie konnten nicht mit einer analytischen Streulösung verglichen werden.

Der Integrationsbereich und die Stützstellenzahl mußten für beide Modellpotentiale kleiner gewählt werden als bei der s-Wellen-Streuung. Die geringere Stützstellenzahl wird durch

das glattere Verhalten der Matrix A bedingt. Die Einschränkung des Definitionsbereichs der GC R ist damit zu erklären, daß die Modellstreuphasen $\delta_1(R)$ mit wachsendem R schneller gegen Null gehen als die Modellstreuphasen $\delta_0(R)$ der s-Wellen-Streuung. D. h. der Bereich der GC R, der die freie Streulösung beschreibt, beginnt bei kleinerem R.

Die GC-Funktion für VS1 konnte wegen der starken Oszillationen nicht graphisch dargestellt werden. Die Funktion C(R) zeigt ein ähnliches Verhalten wie die entsprechende Funktion der s-Wellen-Streuung (Abb. 84 - 86). Die zu VS2 gehörende Gewichtsfunktion c(R) ist ähnlich glatt wie die entsprechende Funktion der s-Wellen-Streuung und kann analog interpretiert werden (Abb. 90 - 93).

3. s-Wellen-Streuung am abstoßenden Exp-Potential

Beim abstoßenden Exp-Potential muß man die Energiebereiche $k^2 < V_0$ und $k^2 > V_0$ unterscheiden. Im ersten Fall gibt es einen klassischen Umkehrpunkt bei

$$r_c = \frac{1}{a} \ln \frac{V_0}{k^2}$$

Im klassisch verbotenen Bereich sollte die WF exponentiell abklingen. Dieses Verhalten zeigt $u_{HW}(r)$ für $k = .5$ (Abb. 94). Im zweiten Fall verschwindet der klassisch verbotene Bereich; die WF ist rein oszillierend. Diese Eigenschaften besitzt $u_{HW}(r)$ für $k = 2$. (Abb. 95). Betrachtet man die Lösung c(R) für $k^2 < V_0$, so erkennt man für VB3 am Ende des Intervalls Ω starke Oszillationen (Abb. 97), die von den großen Unterschieden der Matrixelemente von A herrühren (Abb. 96). Die Funktionen C(R), $C_1(R)$ und $C_2(R)$ sind zwar Funktionen von b.V., besitzen jedoch einen unregelmäßigen funktionalen Verlauf (Abb. 98 - 100), der Ausdruck der numerischen Ungenauigkeiten ist.

Im Gegensatz dazu erzeugt VB1 eine sehr glatte Matrix A (Abb. 101), ähnlich dem Modellpotential VS1; daher zeigt die Gewichtsfunktion c(R) wieder derartige Oszillationen,

daß sie nicht graphisch darstellbar ist. Die Stammfunktion $C(R)$ hat ein ähnliches Verhalten wie die zu VS1 in HWSR und HWPR gehörigen Funktionen $C(R)$ (Abb. 102 - 104).

4. s-Wellen-Streuung am Morsepotential

Das Morsepotential erwies sich als das am schwierigsten zu beschreibende Potential. Der Grund dafür ist die Kombination eines stark repulsiven, kurzreichweitigen Anteils und einer im Vergleich dazu schwach attraktiven Potentialmulde. Während die flache Potentialmulde die freie Welle nur geringfügig stört, ist der Einfluß des repulsiven Teils erheblich. Im Unterschied zu den übrigen Zentralpotentialen mußten das Modellpotential und der Integrationsbereich Ω den einzelnen Energiewerten wesentlich stärker angepaßt werden, um brauchbare Streuphasen η_{HW} zu erhalten. Die Beschreibung der WF $u_{\text{M}}(r)$ ist nur fehlerhaft möglich (Abb. 105, 106). Die Funktion $u_{\text{HW}}(r)$ ist zwar qualitativ richtig, zeigt jedoch bei $r = 6$ ein irreguläres Verhalten. An dieser Stelle verschwindet die effektive Wirkung des Morsepotentials, d. h. die Lösung $c(R)$ (Abb. 108) der HWG reproduziert die Anschlußbedingung zwischen Wechselwirkungsbereich und freier Bewegung nicht richtig. Die WF $u_{\text{HW}}(r)$ in Abb. 106 verhält sich zusätzlich am klassischen Umkehrpunkt falsch. Dies läßt den Schluß zu, daß die Modellpotentiale VM1 und VM2 ungeeignet sind, die drei physikalisch unterschiedlichen Bereiche des Morsepotentials gut zu erfassen. Da die Streuphase η_{HW} in beiden Fällen mit der analytischen Streuphase η_{M} übereinstimmt, wird lediglich die freie Bewegung korrekt wiedergegeben. Die gewählten erzeugenden Funktionen $\chi(R, r)$ sind demnach keine geeignete Basis zur Beschreibung des Morsepotentials, sodaß der entsprechende HW-Ansatz keine Darstellung der Streu-WF $u_{\text{M}}(r)$ ergibt.

Ein Vergleich der Funktionen $C(R)$, $C_1(R)$ und $C_2(R)$ in Abb. 109 - 111 mit den entsprechenden Funktionen in Abb. 98 - 100

legt es nahe, die Lösung $c(R)$ (Abb. 108) als ein Resultat aufzufassen, das mit erheblichen Rundungsfehlern behaftet ist. Dies ist auf die schlechte Konditioniertheit des entsprechenden Gleichungssystems (Tab. 2) und die glatte Struktur der Matrix A (Abb. 107) zurückzuführen.

Als geeigneteres Modellpotential zur Beschreibung des Morsepotentials erscheint eine Kombination einer Potentialbarriere mit einem vorgelagerten Potentialtopf der Form

$$v(R,r) = \begin{cases} v_0^1 & r < r_0 \\ -v_0^2 & r_0 < r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

wo r_0 die Nullstelle des Morsepotentials ist.

Erläuterungen zu den Abb. 64 - 111:

Abb. 64 - 68:

HWSR, VS1, $k = .25$, $\Omega = [0.;6.]$, $N = 40$, SCAL, GELG

Abb. 69 - 74:

HWSR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [0.;30.]$, $N = 64$, SCAL, GELG

Abb. 75 - 78:

HWSR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [0.;30.]$, $N = 64$, SCAL, LLSQ

Abb. 79:

HWSR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [0.;\infty]$, $N = 40$, HYP, GELG

Abb. 80:

HWSR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [0.;\infty]$, $N = 40$, HYP, LLSQ

Abb. 81:

HWSR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [0.;\infty]$, $N = 64$, HYP, MFGR

Abb. 82:

HWSR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [0.;15.]$, $N = 72$, SIM, GELG

Abb. 83 - 87:

HWPR, VS1, $k = .25$, $\Omega = [0.;5.]$, $N = 32$, SCAL, GELG

Abb. 88 - 93:

HWPR, VS2, $k = .25$, $\Omega = [.25;10.]$, $N = 32$, HYP, GELG

Abb. 94, 96 - 100:

HWBR, VB3, $k = .5$, $\Omega = [0.; 30]$, $N = 48$, SCAL, GELG

Abb. 95, 101 - 104:

HWBR, VB1, $k = 2.$, $\Omega = [0.; 20.]$, $N = 80$, SCAL, GELG

Abb. 106:

HWMOR, VM1, $k = 1.$, $\Omega = [0.; 7.5]$, $N = 40$, SCAL, GELG

Abb. 105, 107 - 111:

HWMOR, VM2, $k = 1.$, $\Omega = [0.; 7.5]$, $N = 40$, SCAL, GELG

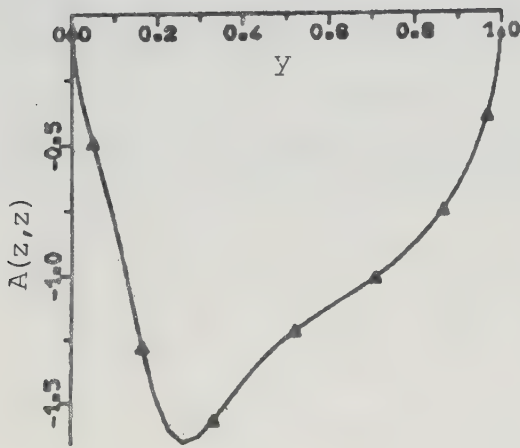


Abb. 64: Diagonale der Matrix

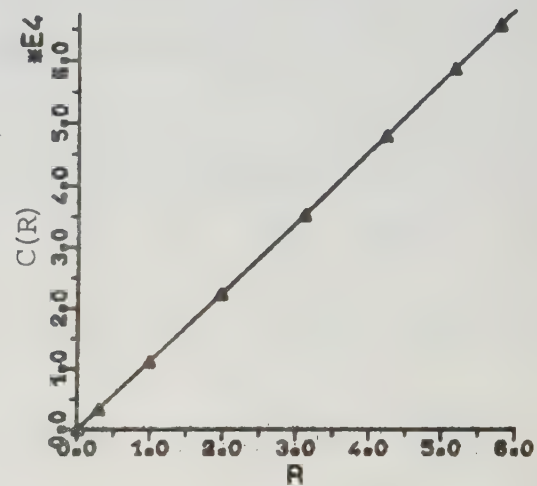


Abb. 65: Stammfunktion $C(R)$

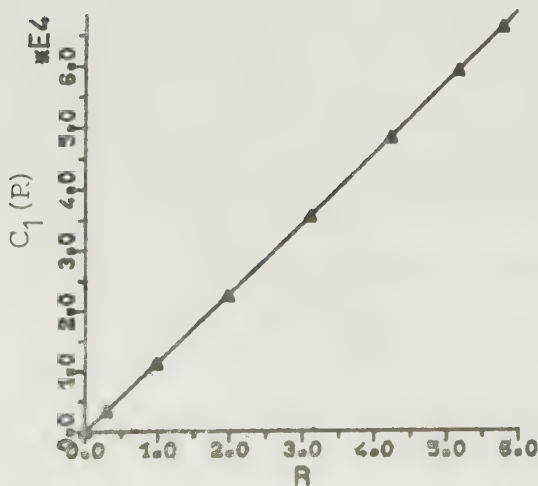


Abb. 66: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

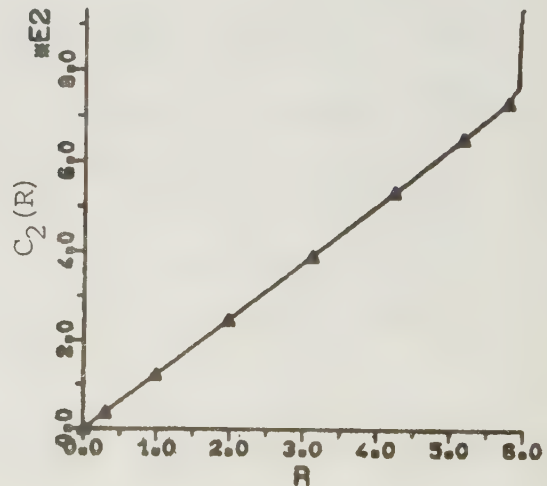


Abb. 67: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

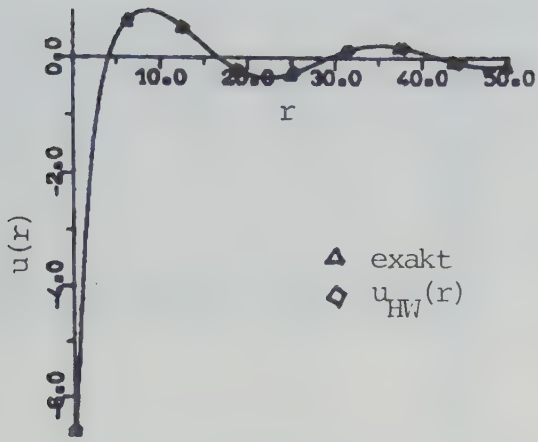


Abb. 68: Streu-WF $u_0(r)$

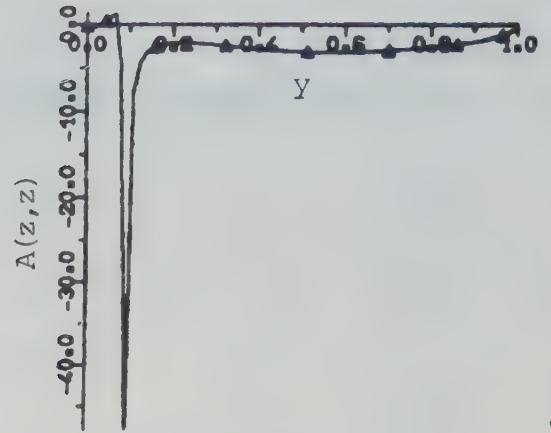


Abb. 69: Diagonale der Matrix

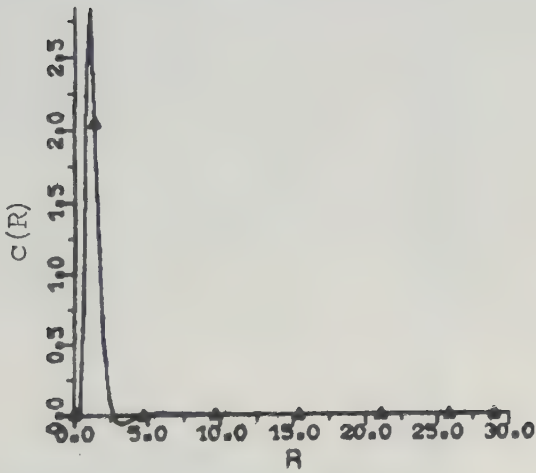


Abb. 70: Gewichtsfunktion

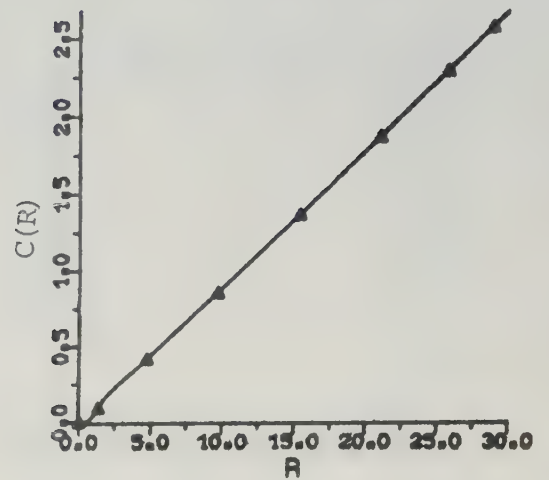


Abb. 71: Stammfunktion $C(R)$

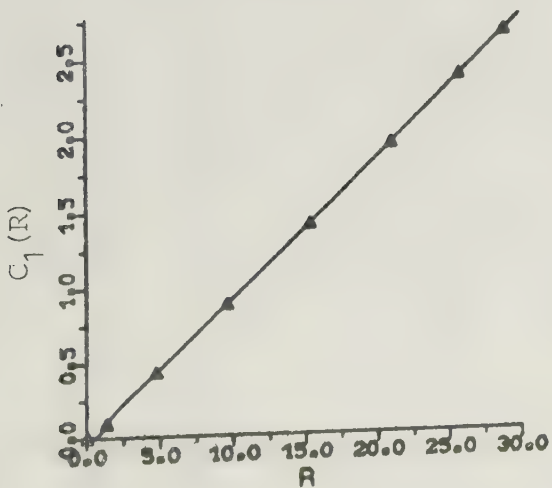


Abb. 72: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

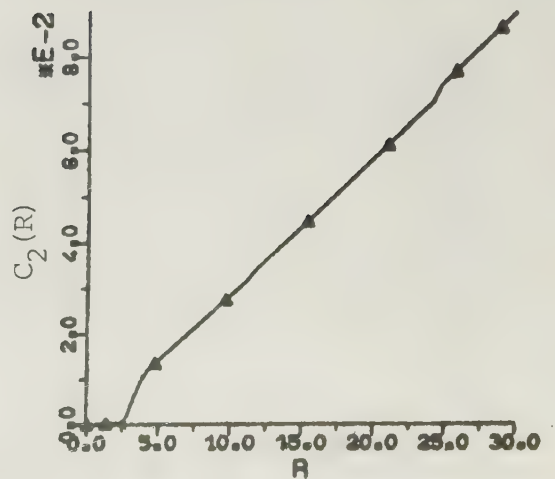


Abb. 73: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

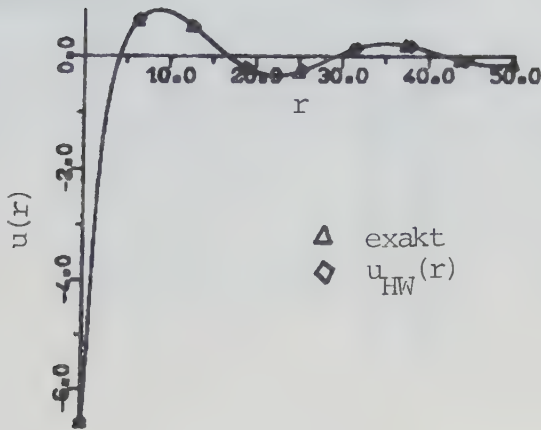


Abb. 74: Streu-WF $u_o(r)$

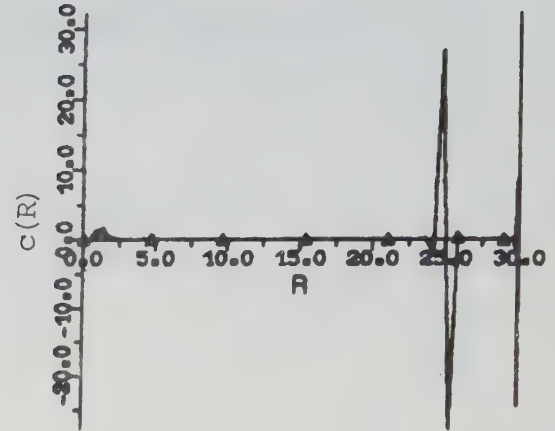


Abb. 75: Gewichtsfunktion

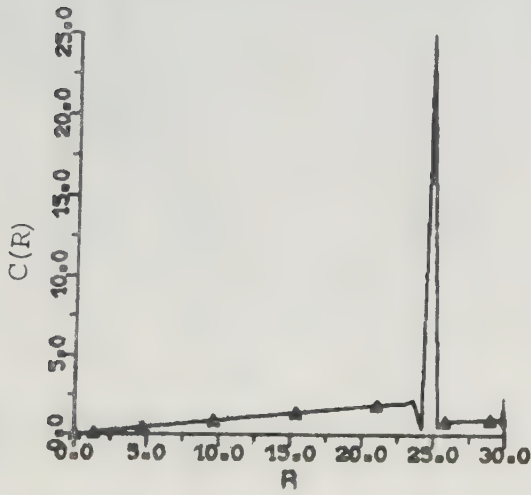


Abb. 76: Stammfunktion $C(R)$

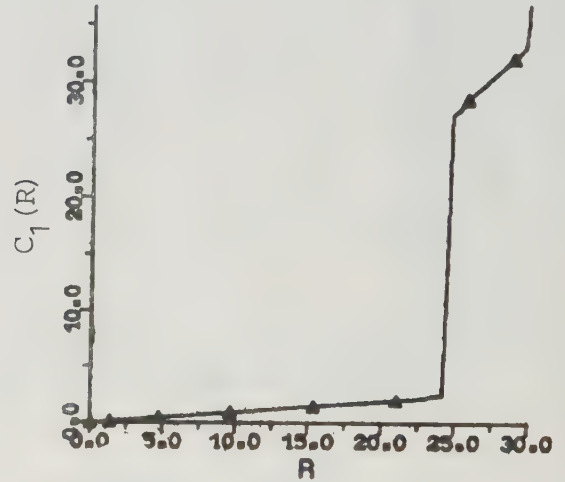


Abb. 77: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

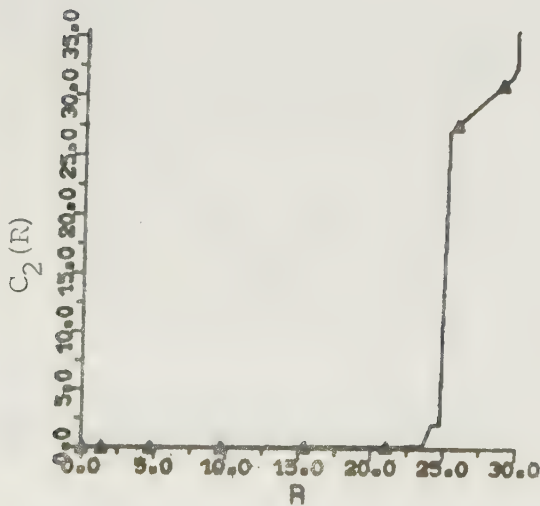


Abb. 78: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

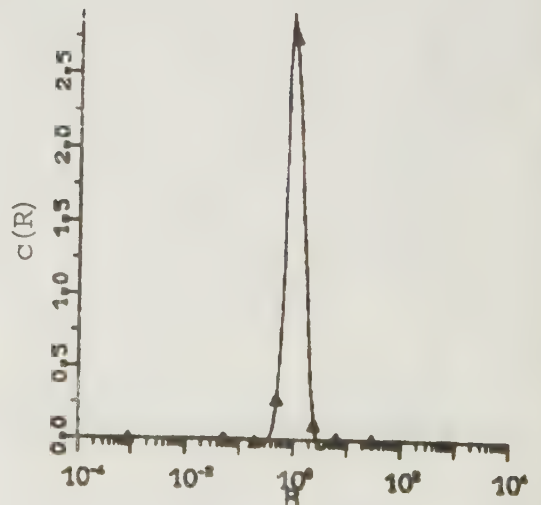


Abb. 79: Gewichtsfunktion

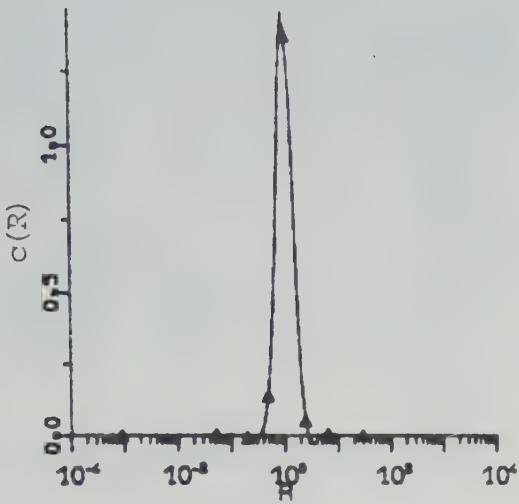


Abb. 80: Gewichtsfunktion

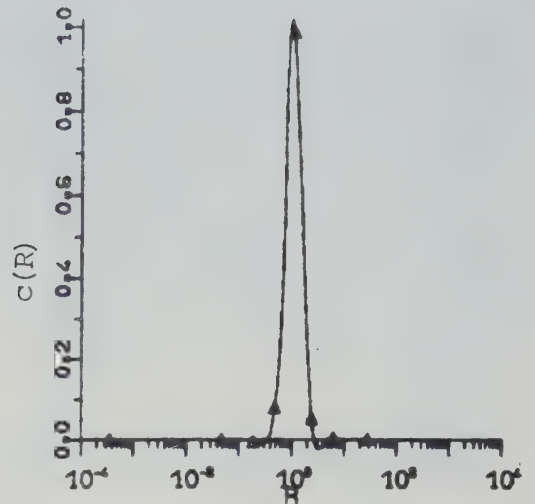


Abb. 81: Gewichtsfunktion

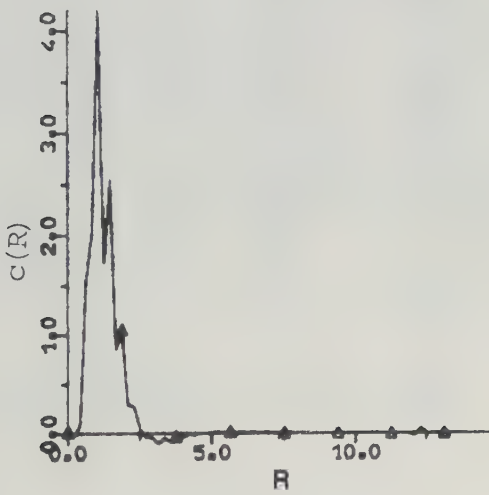


Abb. 82: Gewichtsfunktion

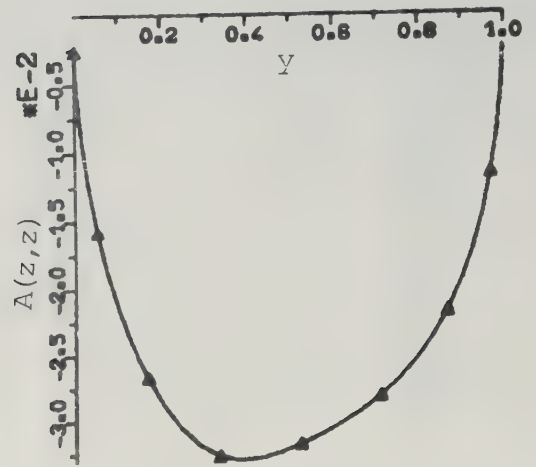


Abb. 83: Diagonale der Matrix

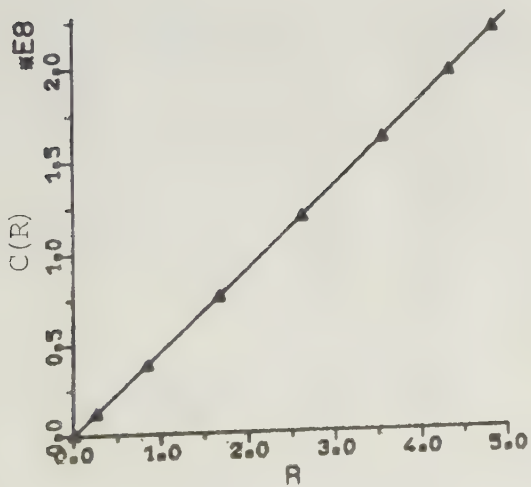


Abb. 84: Stammfunktion $C(R)$

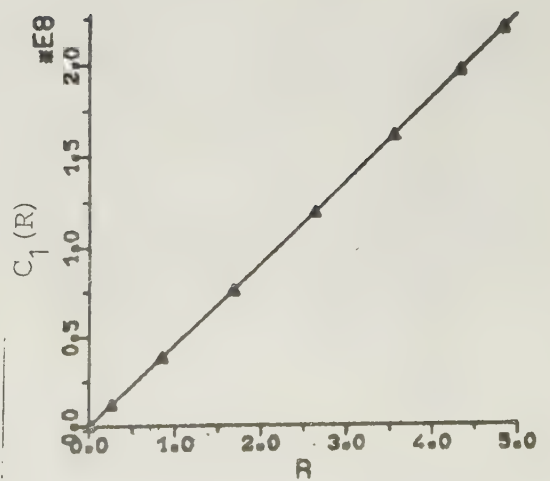


Abb. 85: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

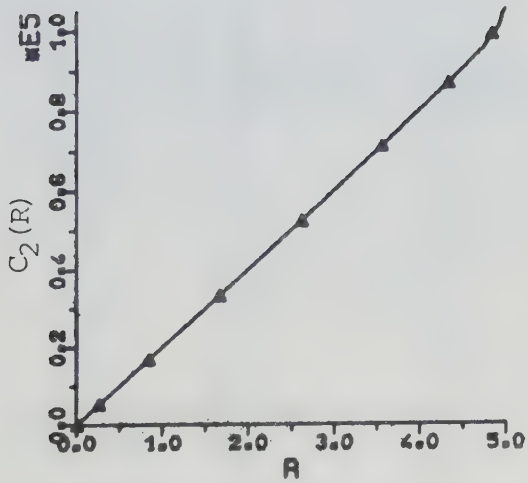


Abb. 86: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

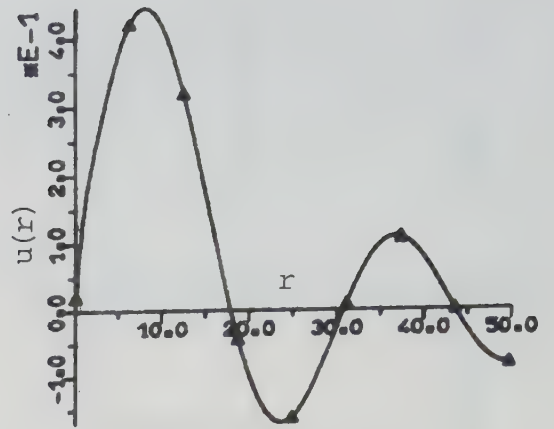


Abb. 87: Streu-WF $u_1(r)$

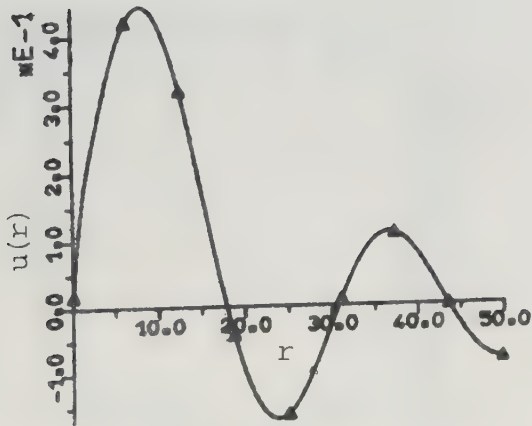


Abb. 88: Streu-WF $u_1(r)$

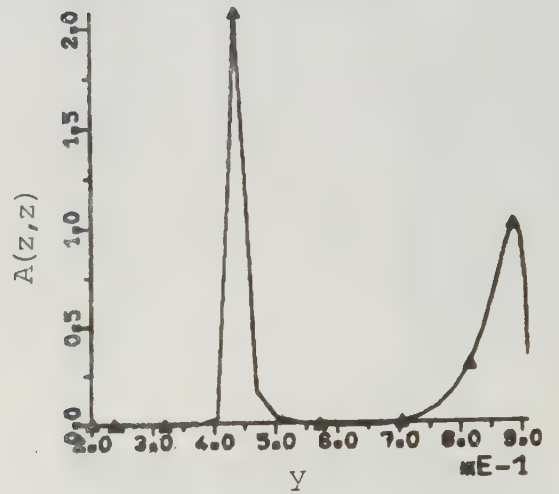


Abb. 89: Diagonale der Matrix

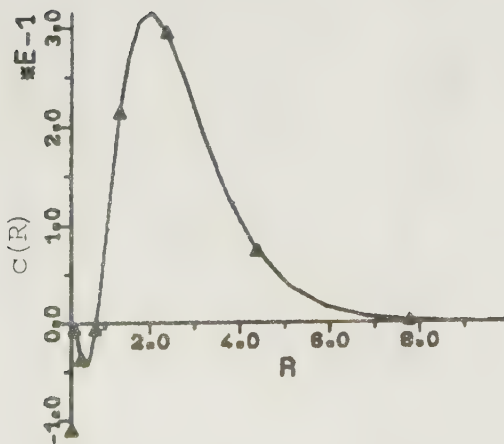


Abb. 90: Gewichtsfunktion

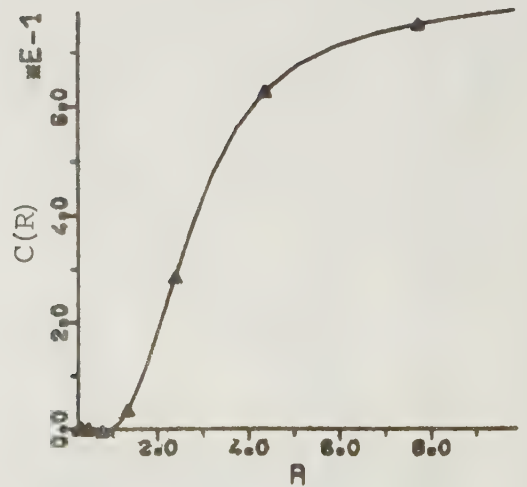


Abb. 91: Stammfunktion $C(R)$

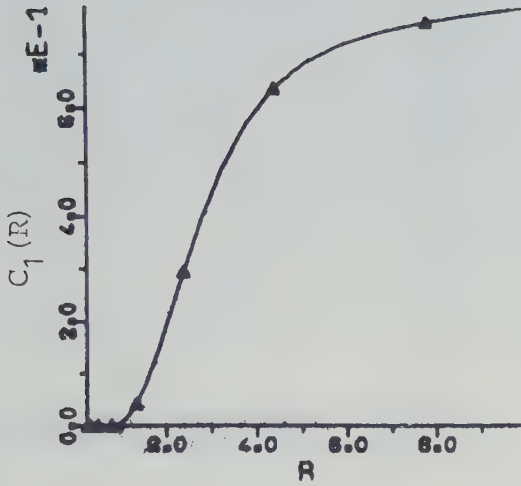


Abb. 92: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

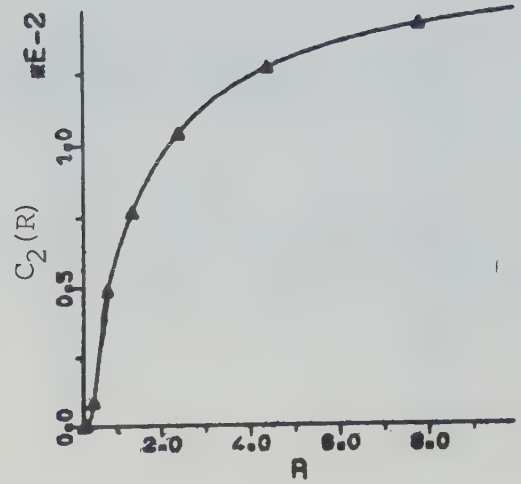


Abb. 93: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

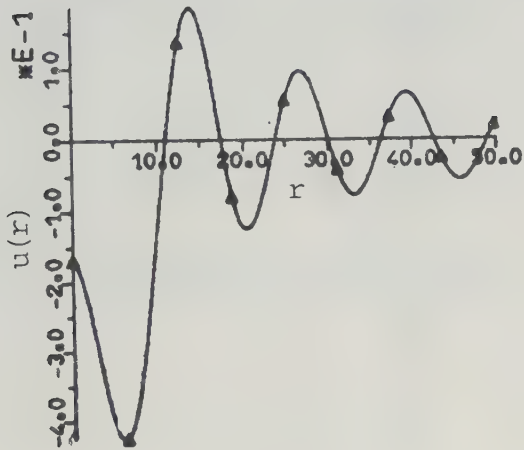


Abb. 94: Streu-WF $u_B(r)$

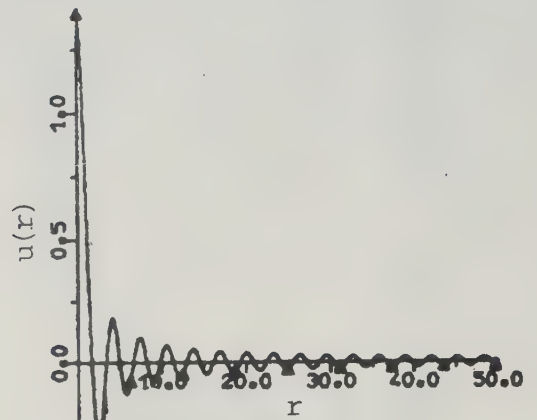


Abb. 95: Streu-WF $u_B(r)$

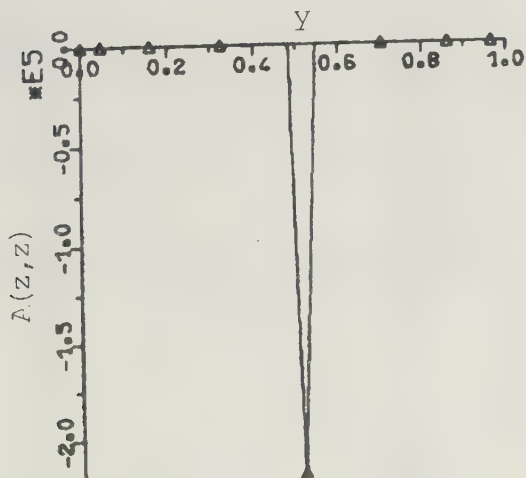


Abb. 96: Diagonale der Matrix

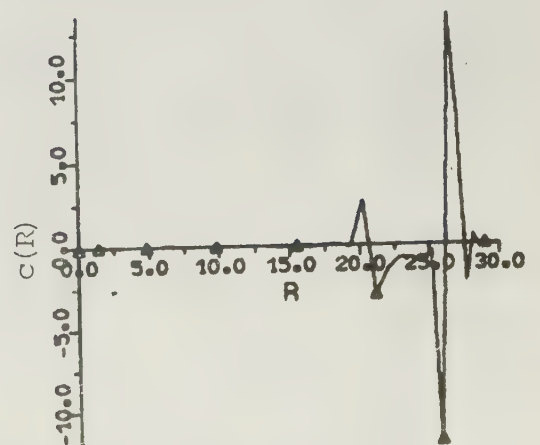


Abb. 97: Gewichtsfunktion

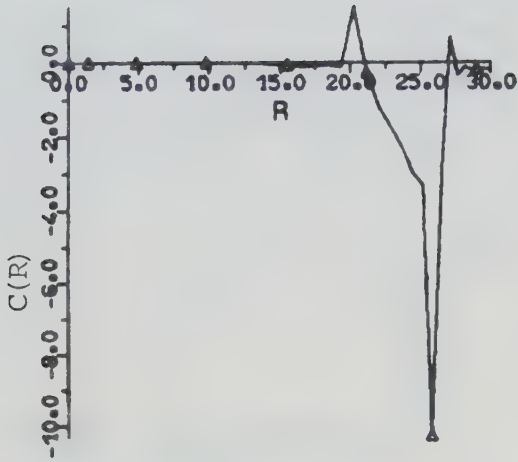


Abb. 98: Stammfunktion $C(R)$

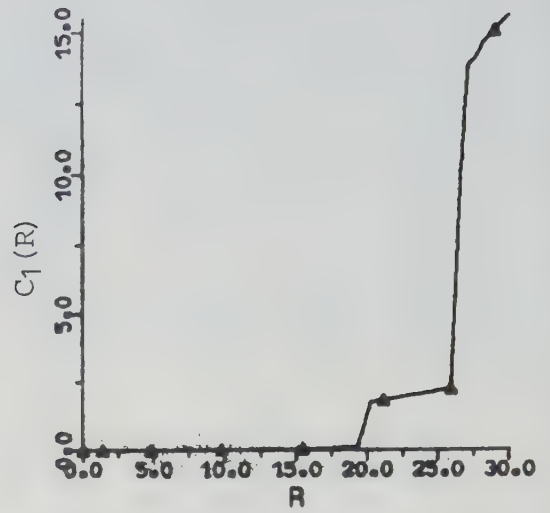


Abb. 99: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

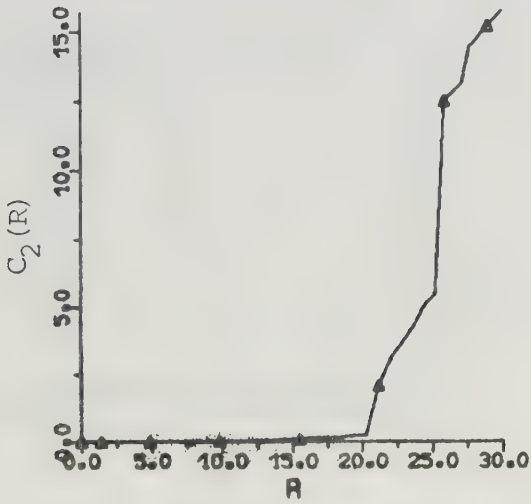


Abb. 100: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

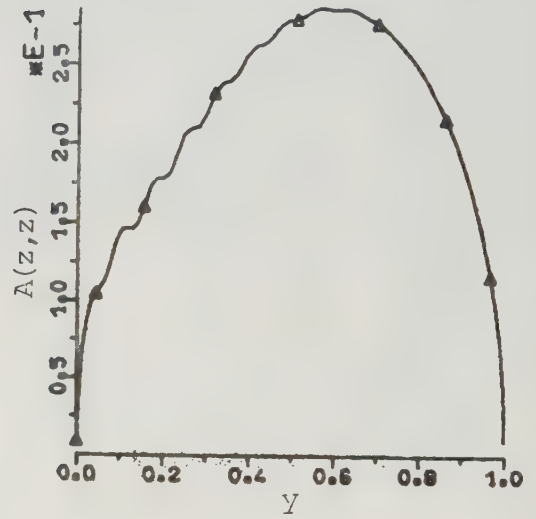


Abb. 101: Diagonale der Matrix

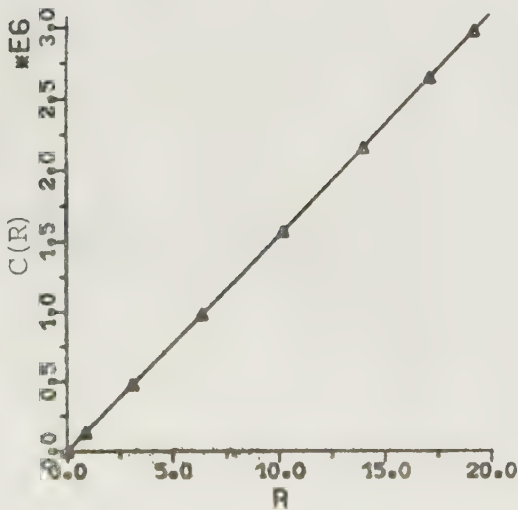


Abb. 102: Stammfunktion $C(R)$

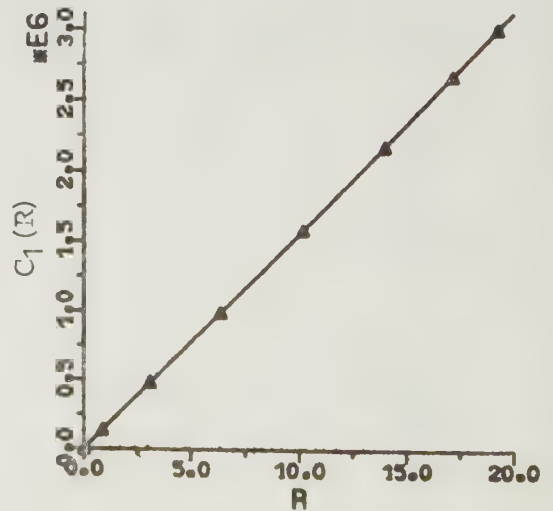


Abb. 103: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

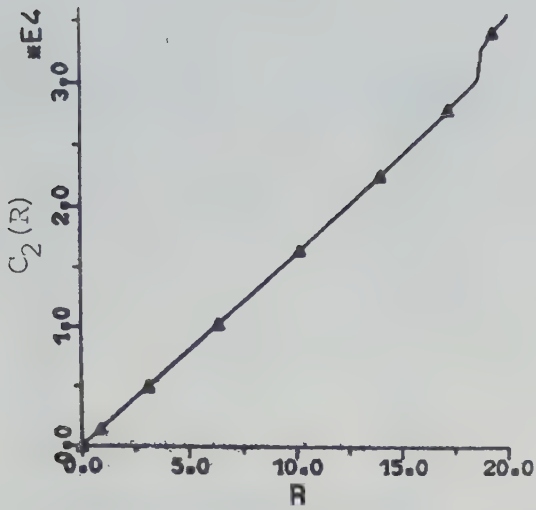


Abb. 104: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

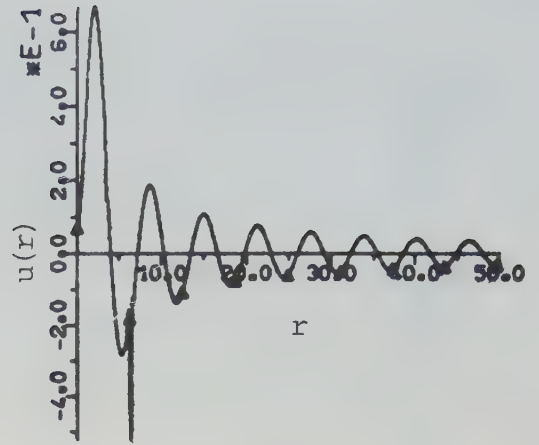


Abb. 105: Streu-WF $u_M(r)$

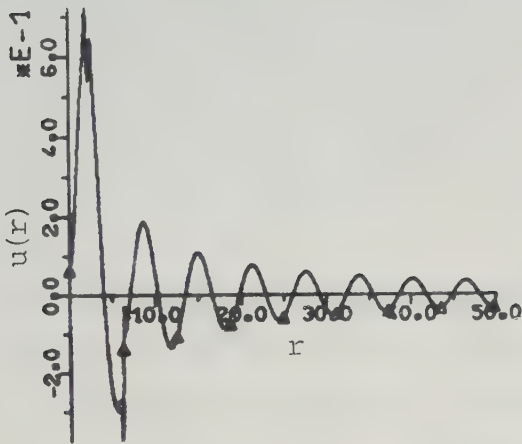


Abb. 106: Streu-WF $u_M(r)$

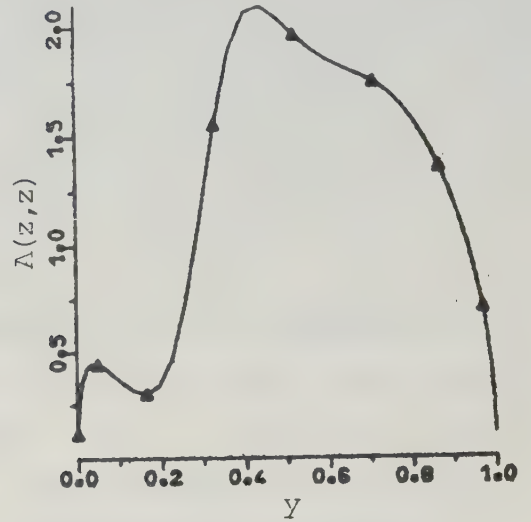


Abb. 107: Diagonale der Matrix

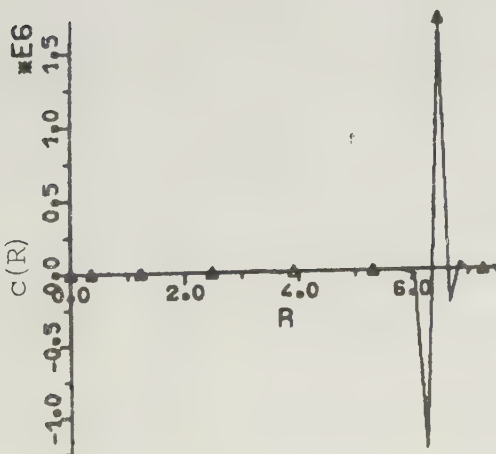


Abb. 108: Gewichtsfunktion

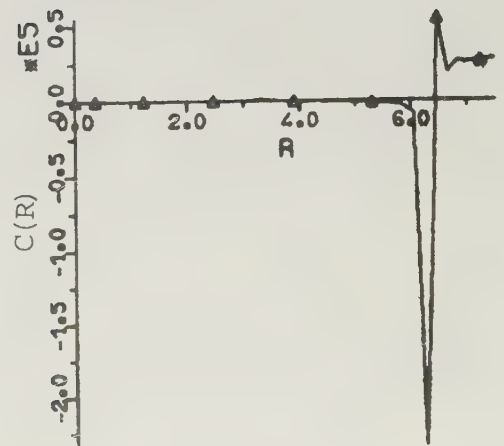


Abb. 109: Stammfunktion $C(R)$

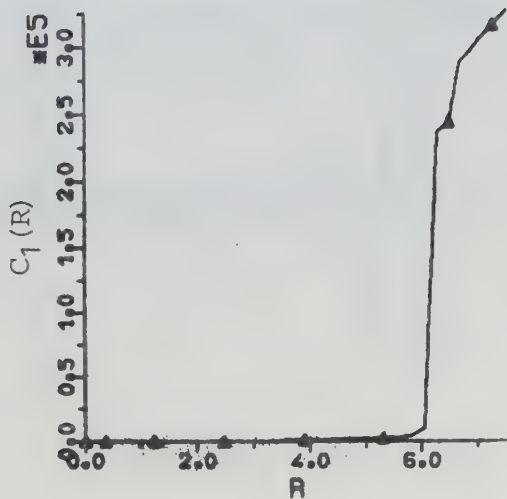


Abb. 110: Verteilungsfunktion $C_1(R)$

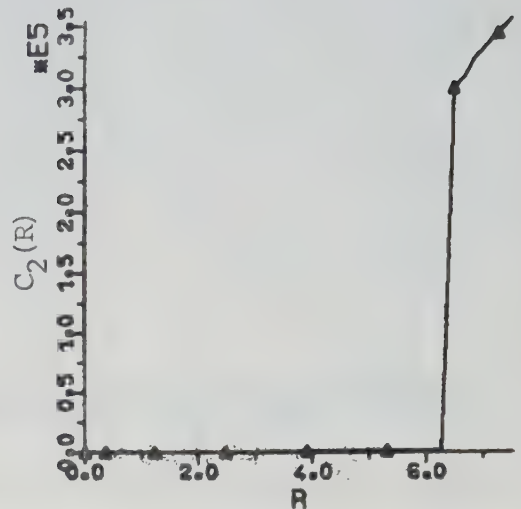


Abb. 111: Verteilungsfunktion $C_2(R)$

4.3 Ansätze zur Verbesserung der schlechten Konditioniertheit

Das Problem der schlechten Konditioniertheit eines Gleichungssystems resultiert aus den Rundungsfehlern numerischer Lösungsverfahren. Die auftretenden Rundungsfehler kann man durch eine verbesserte Rechengenauigkeit verkleinern. Daher wurde getestet, ob eine vierfachgenaue Lösung der diskretisierten HWGen (3.26) und (3.27) weniger instabile Gewichtsfunktionen $\underline{c}$ ermöglicht. Der Effekt war so geringfügig, daß man auf diesen numerischen Aufwand verzichten konnte.

4.3.1 Monte-Carlo-Verfahren

Das Monte-Carlo-Verfahren bietet die Möglichkeit, die HWG mit mehreren GCen zu lösen. Man sollte daher eine verbesserte Lösung $c(R)$ der HWG erwarten, falls das resultierende Gleichungssystem numerisch stabil ist.

Als Beispiele wurden die s- und p-Wellen-Streuung am anziehenden

Exp-Potential untersucht. Als GCen wurden die Potentialtopfbreite R und -tiefe v_0 gewählt.

Im Unterschied zu den bisher beschriebenen Integrationsmethoden arbeitet das Monte-Carlo-Verfahren mit zufällig ausgewählten, in der (R, v_0) -Ebene gleichverteilten Wertepaaren (R, v_0) . Auf diese Weise konnte überprüft werden, ob die Gleichungssysteme (3.26) und (3.27) hauptsächlich deshalb schlecht konditioniert sind, weil über das Modellpotential ein funktionaler Zusammenhang der GC R mit der Potentialtopftiefe v_0 gegeben ist. Die durchgeführten Rechnungen waren jedoch mit ähnlichen Schwierigkeiten verbunden wie im Fall einer GC. Insbesondere stellte sich heraus, daß das Rechteck, das beide GCen in der (R, v_0) -Ebene bilden, innerhalb bestimmter Grenzen liegen muß, damit man brauchbare Streuphasen η_{HW} erhält. Insgesamt war die Berechnung der Streuphasen weder einfacher noch stabiler als im Fall einer GC. Daraus kann man folgern, daß die Einführung mehrerer GCen die Probleme, die die HWG als inkorrekt gestelltes Problem aufwirft, nicht beheben kann.

4.3.2 Veränderung der Diskretisierung

Im Abschn. 3.2.2 wurde das Problem der Diskretisierung der HWG diskutiert. Es wurde erwähnt, daß die Wahl der Stützstellen in R und R' unabhängig voneinander sein kann. Die Lösung des entsprechenden Gleichungssystems brauche keine Näherung der Gewichtsfunktion $c(R)$ zu sein. Am Beispiel der p -Wellen-Streuung am Exp-Potential wurde untersucht, ob ein Gleichungssystem der Form

$$\sum_{i=1}^N A(x_j, z_i) \tilde{c}(z_i) = C g(x_j) \quad j = 1, \dots, N$$

mit unterschiedlich gewählten Stützstellen x_i und z_i besser konditioniert sei, als dasjenige mit gleichen Stützstellen

in R und R' . Es wurden beliebige Kombinationen der Stützstellenverteilungen HYP, SCAL und SIM für R' und R gewählt. Das Gleichungssystem wurde mit gleicher Stützstellenzahl N für alle x_i und z_i mit dem Verfahren GELG gelöst. Die resultierenden approximativen Streuphasen η_{HW} waren deutlich schlechter als diejenigen, die aus dem Gleichungssystem (3.27) folgen. Daraus ist zu schließen, daß die Lösung des obigen Gleichungssystems keine angemessene Näherung der Gewichtsfunktion $c(R)$ ergibt.

4.3.3 Änderung des Integralkerns

Die Idee besteht darin, den HW-Ansatz nur für den effektiven Wirkungsbereich des untersuchten Potentials zu formulieren. Man schreibt die Streu-WF als

$$u_1(r) = \begin{cases} \int_{\Omega} dR \, c_1(R) \, \chi_1(R, r) & r < R_C \\ \hat{j}_1(kr) - \tan \eta_1 \, \hat{n}_1(kr) & r > R_C \end{cases}$$

Die Funktionen $\chi_1(R, r)$ sind die bekannten erzeugenden Funktionen, η_1 ist die gesuchte Streuphase und R_C die Reichweite des untersuchten Zentralpotentials. Da die Lösung im Bereich $r > R_C$ bis auf die Streuphase η_1 bekannt ist, liefert die HWG die Streu-WF im Innenbereich $r < R_C$. Die zu lösende HWG lautet

$$\int_{\Omega} dR \, c_1(R) \, K_1(R', R, R_C) = 0$$

mit dem Kern

$$K_1(R', R, R_C) = \int_0^{R_C} dr \, \chi_1(R', r) \left[V(r) - v(R, r) \right] \chi_1(R, r)$$

Die Lösung $c_1(R)$ muß die Nebenbedingung

$$\int_{\Omega} dR c_1(R) + kR_C^2 \left[\hat{n}'_1(kR_C) \int_{R_C}^{R_{\max}} dR c_1(R) \chi_{in}(R, R_C) - \right. \\ \left. - \hat{n}_1(kR_C) \int_{R_C}^{R_{\max}} dR c_1(R) \chi'_{in}(R, R_C) \right] = 1$$

erfüllen, die aus der Anschlußbedingung der WF $u_1(r)$ bei $r = R_C$ folgt. $\chi_{in}(R, r)$ ist die Lösung der SGL für einen Potentialtopf im Innenbereich. $\chi'_{in}(R, R_C)$ bezeichnet die Ableitung von $\chi_{in}(R, r)$ nach r an der Stelle $r = R_C$. Zudem liefert die Anschlußbedingung eine Darstellung der Streuphase η_1 :

$$\operatorname{tg} \eta_1 = \int_{R_{\min}}^{R_C} dR c_1(R) \operatorname{tg} \delta_1(R) + kR_C^2 \left[\hat{j}'_1(kR_C) \times \right. \\ \left. \times \int_{R_C}^{R_{\max}} dR c_1(R) \chi_{in}(R, R_C) - \hat{j}_1(kR_C) \int_{R_C}^{R_{\max}} dR c_1(R) \chi'_{in}(R, R_C) \right]$$

Man stellt fest, daß die dem Kern $K_1(R', R, R_C)$ entsprechende Matrix bereits für kleine Stützstellenzahlen singulär wird, d. h. das Integral über R nur schlecht approximiert werden kann. Demzufolge sind die Streuphasen η_{HW} unbefriedigend. Dieses Ergebnis kann man dahingehend interpretieren, daß die HWG Informationen über die freie Bewegung enthalten muß, um numerisch brauchbare Resultate zu erzielen.

5. Numerische Ergebnisse

5.1 s-Wellen-Streuung am attraktiven Exp-Potential

Die folgende Tabelle zeigt eine ausgezeichnete Übereinstimmung der approximativen Streuphase η_{HW} mit der exakten Streuphase η_0 . $\bar{\eta}_0$ resultiert aus der Integraldarstellung der Streuphase mit einer numerisch berechneten Streu-WF [Wo 63], η_0^W ist die von [Wo 63] genäherte Streuphase, η_0^S die Näherung von [Sw 60] und η_0^P diejenige von [PP 75].

Tab. 4:

k	η_0	η_{HW}	$\bar{\eta}_0$	η_0^W	η_0^S	η_0^P
0.1	2.6595	2.6595	2.6310	2.6351	2.6279	2.6843
0.25	2.1110	2.1110	2.0672	2.0927	2.0796	2.1438
0.5	1.5850	1.5850	1.5440	1.6231	1.5230	1.6021
1.0	1.0875	1.0875	1.0890	1.1588	1.0301	1.0858

Wie wirkungsvoll die GCM zur Beschreibung dieses Potentials ist, zeigt die folgende Tabelle, in der die aus (4.6) stammende Streuphase η_{HW} mit der exakten Streuphase η_0 verglichen wird. Die maximale Tiefe des Exp-Potentials beträgt $U_0 = -216.8$ MeV.

Tab. 5:

E (MeV)	η_0	η_{HW}
0.01	3.0636588	3.0636587
0.1	2.8974581	2.8974578
1.5	2.3017135	2.3017129
6.0	1.7946309	1.7946304
25.0	1.2606739	1.2606699
100.0	0.8168671	0.8168363
500.0	0.4349910	0.4349813
1000.0	0.3191572	0.3191575

5.2 p-Wellen-Streuung am attraktiven Exp-Potential

In der folgenden Tabelle wird die aus (4.6) folgende Näherungslösung η_{HW} mit anderen genäherten Streuphasen verglichen. Eine exakte Streuphase liegt in diesem Fall nicht vor. $\bar{\eta}_1$ stammt aus der Integraldarstellung der Streuphase, die eine numerisch genäherte Streulösung enthält [Wo 63], η_1^W ist die Näherung von [Wo 63] und η_1^S diejenige von [Sw 60].

Tab. 6:

k	η_{HW}	$\bar{\eta}_1$	η_1^W	η_1^S
0.1	0.0016	0.0020	0.0021	0.0019
0.25	0.0232	0.0294	0.0290	0.0286
0.5	0.1382	0.1404	0.1430	0.1385
1.0	0.3917	0.3931	0.3945	0.4039

5.3 s-Wellen-Streuung am repulsiven Exp-Potential

Die folgende Tabelle zeigt eine gute Übereinstimmung der GC-Streuphase η_{HW} mit der exakten Streuphase η_B sowohl im Bereich $k^2 < V_0$ wie für $k^2 > V_0$ ($V_0 = 1.025$). η_{BN} bezeichnet die Born'sche Näherung der Streuphase.

Tab. 7:

k	η_B	η_{HW}	η_{BN}
0.25	-1.9752	-1.9743	-1.3594
0.5	-2.4600	-2.4600	-1.2450
0.75	-2.2063	-2.2066	-1.1222
1.0	-1.7440	-1.7441	-1.0087
2.0	-0.83467	-0.83480	-0.67989
3.0	-0.54860	-0.54869	-0.49578
4.0	-0.40939	-0.40951	-0.38577
5.0	-0.32675	-0.32665	-0.31430
7.5	-0.21733	-0.21721	-0.21353
10.0	-0.16287	-0.16286	-0.16125

5.4 s-Wellen-Streuung am Morsepotential

Auch beim Morsepotential stimmen die aus (4.6) folgenden Streuphasen η_{HW} gut mit den exakten Streuphasen η_{M} überein. Die $k = 7.5$ entsprechende Energie liegt über dem Maximum des Morsepotentials bei $r = 0$ ($V_{\text{M}}(r=0) = 36.3$). η_{BN} ist wieder die Born'sche Näherung der Streuphase.

Tab 8:

k	η_{M}	η_{HW}	η_{BN}
1.0	-0.90688	-0.90697	-1.2876
1.5	-1.3655	-1.3657	-1.2887
2.0	-1.6606	-1.6607	-1.2577
2.5	-1.8330	-1.8325	-1.2167
3.0	-1.9094	-1.9111	-1.1722
4.0	-1.8556	-1.8556	-1.0817
5.0	-1.6505	-1.6507	-0.99542
7.5	-1.1326	-1.1340	-0.81199

6. Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit legt nahe, die GCM als ein durchaus wirkungsvolles Verfahren zur Lösung quantenmechanischer Probleme anzusehen. Es hat sich als sinnvolle Erweiterung erwiesen, als erzeugende Funktionen außer den bisher gebräuchlichen diskreten Zuständen auch Kontinuumszustände zu verwenden. Wenn man davon absieht, daß die Interpretation der Gewichtsfunktion $c(\underline{\alpha})$ keinen Zusammenhang mehr mit physikalisch anschaulichen Größen liefert, so kann man die resultierende HWG doch als klar definiertes mathematisches Problem im BR begreifen. Die auftretenden Probleme eines schlecht konditionierten Gleichungssystems sind mathematisch begründet, auch wenn zu ihrer Überwindung keine allgemeingültigen Vorschriften existieren.

Aus dem in dieser Arbeit gewählten HW-Ansatz ergeben sich verschiedene Probleme:

Die Formulierung der stationären Streutheorie in der GCM mit Kontinuumsfunktionen als erzeugenden Funktionen entspricht einer Transformation der Lösung $u(r)$ im quantenmechanischen HR auf eine Lösung $c(R)$ im BR $\mathcal{L}_1[\Omega]$, dem Raum der absolut integrierbaren Funktionen. Sowohl der HW-Ansatz wie die resultierende HWG können als FIGl 1. Art verstanden werden und bilden damit inkorrekt gestellte Probleme. Die erzeugenden Funktionen des HW-Ansatzes kann man als Integralkern betrachten, zu dem ein kompakter Integraloperator gehört, dessen inverser Operator nicht beschränkt ist. Zum Spektrum des Integraloperators gehören nämlich infinitesimal kleine Eigenwerte und u. U. der Eigenwert Null. Bislang existieren nur für den Funktionenraum $\mathcal{L}_2$ definierte Lösungsverfahren, die mathematisch fundiert sind.

Außerdem wurde gezeigt, daß die aus dem modifizierten HW-Ansatz (3.18) resultierende HWG das Hulthén-Kohn'sche Variations-

prinzip erfüllt. Dieses ist im Gegensatz zum Ritz'schen Variationsprinzip kein Extremalprinzip. Folglich darf man nicht erwarten, daß die durch die Lösung der HWG gegebene Streuphase durch Verbesserung der "Basis" gegen einen Grenzwert konvergiert. Allerdings gibt es verschiedene Kriterien, die die richtige Streuphase immer erfüllt:

- a) Die Lösung der diskretisierten HWG erfüllt diese bis auf kleine numerische Fehler.
- b) Die Darstellung (3.15) der Streuphase, die aus dem HW-Ansatz folgt, und die Integraldarstellung der Streuphase (3.34) stimmen überein.
- c) Die Streuphase η_{HW} aus (4.6) ist unabhängig von der gewählten Quadraturformel, vorausgesetzt die Approximation des Integrals ist hinreichend gut.
- d) Die Streuphase η_{HW} ist nicht vom Modellpotential abhängig.
- e) Kleine Änderungen des Definitionsbereichs der GC haben keinen Einfluß auf η_{HW} .

Schließlich ist die Wahl des Modellpotentials und des Definitionsbereichs der GC nicht trivial. Das Modellpotential ist verantwortlich für die Struktur des Integralkerns und damit für die Stabilität der Lösung $c(\underline{\alpha})$ der HWG. Um brauchbare Lösungen zu erzielen, muß das Modellpotential dem untersuchten Potential günstig angepaßt sein. Wann ein Modellpotential günstige Eigenschaften besitzt, kann nicht allgemein festgelegt werden. Zusätzlich bestimmt das Modellpotential den Definitionsbereich der GC, der dann als gut gewählt angesehen werden kann, wenn die resultierende Streuphase η_{HW} die oben angeführten Kriterien erfüllt.

Andererseits beweisen die in Kap. 5 aufgeführten Ergebnisse, daß die Anwendung der GCM auf einfache Potentialstreuprobleme sinnvoll ist. Im Unterschied zu vielen anderen Näherungsverfahren zur Lösung der stationären SGL für Kontinuumszustände liefert die GCM über weite Energiebereiche sehr gute Ergebnisse.

Vor allen Dingen muß man den HW-Ansatz der Energie nur geringfügig anpassen, was ein entscheidender Vorzug dieses Verfahrens ist. Zudem ist der numerische Aufwand begrenzt, speziell die Rechenzeiten sind relativ kurz. Typische CPU-Zeiten liegen zwischen 10 und 300 sec. auf der IBM 3032. Die Effektivität der GCM beweisen nicht zuletzt die berechneten Streu-WFen $u_{HW}(r)$, die im Fall der s-Wellen-Streuung am attraktiven Exp-Potential mit der analytischen Lösung fast identisch sind. Dies legt den Schluß nahe, daß die physikalisch entscheidenden Größen trotz der mathematischen Schwierigkeiten sehr gut wiedergegeben werden.

Es erscheint somit sinnvoll, das Anwendungsgebiet der hier geschilderten Methode auf die Streuung von zusammengesetzten Systemen zu erweitern. In diesem Fall beschreiben die erzeugten Funktionen $\phi_{\underline{k},c}^{(+)}(\underline{\alpha},\underline{x})$ Streuzustände des Gesamtsystems in den einzelnen Streukanälen c. Sie erfüllen die asymptotische Randbedingung

$$\phi_{\underline{k},c}^{(+)}(\underline{\alpha},\underline{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \phi_{\underline{k},c}^0(\underline{\alpha},\underline{x}) + \sum_{c'} A_{c',c} \chi_{c'}(\underline{\xi}) \frac{e^{ik_{c',r}}}{r}$$

wo $A_{c',c}$ die Streuamplitude für den Übergang des Anfangszustandes $\phi_{\underline{k},c}^0(\underline{\alpha},\underline{x})$ in den Endzustand

$$\phi_{\underline{k},c'}^0(\underline{\alpha},\underline{x}) = \chi_{c'}(\underline{\xi}) e^{ik_{c',r}}$$

ist. $\chi_{c'}(\underline{\xi})$ beschreibt einen gebundenen Zustand des Gesamtsystems und $\underline{r}$ ist die Koordinate der Relativbewegung. Der entsprechende HW-Ansatz

$$\psi_{\underline{k}}^{(+)}(\underline{x}) = \sum_c \int d\underline{\alpha} c_c(\underline{\alpha}) \phi_{\underline{k},c}^{(+)}(\underline{\alpha},\underline{x})$$

führt auf ein System von gekoppelten IGLen, das grundsätzlich wie eine einzelne IGL gelöst wird. Auf analoge Weise läßt sich der quantenmechanische Tunneleffekt formulieren, der in der Kern- und Molekülphysik besondere Bedeutung besitzt.

Eine zusätzliche Erweiterung der GCM ist ihre zeitabhängige Formulierung. Man versucht, die Lösung $|\Psi\rangle$ der zeitabhängigen SGL

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H|\Psi\rangle = (\hat{t} + V(t))|\Psi\rangle$$

mit dem HW-Ansatz

$$|\Psi\rangle = \sum_{\underline{c}} \int d\underline{\alpha} \ c_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t) |\phi_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t)\rangle$$

zu beschreiben. Die GC $\underline{\alpha}$ ist nicht explizit zeitabhängig. Erfüllen die erzeugenden Funktionen $|\phi_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t)\rangle$ eine zeitabhängige SGL der Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t)\rangle = h|\phi_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t)\rangle$$

mit $h = \hat{t} + v(\underline{\alpha})$ ($\hat{t}$ bezeichnet den Operator der kinetischen Energie und $v(\underline{\alpha})$ das Modellpotential), so erhält man als Resultat ein System von gekoppelten Integrodifferentialgleichungen für die Gewichtsfunktionen $c_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t)$, das formal als

$$\dot{\underline{c}} = S^{-1} V \underline{c}$$

geschrieben werden kann. $\underline{c}$ ist der Satz aller GC-Funktionen $c_{\underline{c}}(\underline{\alpha}, t)$. Der Integraloperator S erzeugt den Überlappkern der Modellfunktionen und der Operator V einen Kern, der die Differenz der Potentiale $v(\underline{\alpha})$ und $V(t)$ enthält.

Die Diskretisierung der obigen Integrodifferentialgleichung führt auf ein System von gekoppelten DGLen, für das Standardlösungsverfahren existieren.

Sowohl die hier vorgestellte zeitunabhängige wie die zeitabhängige Formulierung der GCM für Stöße zusammengesetzter Systeme

könnte gegenüber den sonst üblichen Verfahren den Vorteil bieten, nur eine kleine Anzahl von Basisfunktionen $|\phi_c\rangle$ zur Lösung der SGl zu benötigen, wenn die GC a physikalisch sinnvoll gewählt wird.

7. Anhang

7.1 Liste der verwendeten Abkürzungen

b.V.	- beschränkte Variation (s.S. 6)
f.ü.	- fast überall
o.B.d.A.	- ohne Beschränkung der Allgemeinheit
BR	- Banachraum
CM	- Schwerpunkt (s.S. 20)
Exp-Potential	- Exponentialpotential
DGl	- Differentialgleichung
DWA	- "distorted wave approximation"
FIGl	- Fredholm-Integralgleichung
GC	- Generatorkoordinate
GCM	- Generatorkoordinatenmethode
GELG	- (s.S. 82)
GOA	- "Gaussian overlap approximation"
HR	- Hilbertraum
HW-Ansatz	- Hill-Wheeler-Ansatz
HWBR	- s-Wellen-Streuung am repulsiven Exp-Potential
HWG	- Hill-Wheeler-Gleichung
HWMOR	- s-Wellen-Streuung am Morsepotential
HWPR	- p-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential
HWSR	- s-Wellen-Streuung am anziehenden Exp-Potential
HYP	- (s.S. 78)
IGl	- Integralgleichung
KOS	- Koordinatensystem
LLSQ	- (s.S. 81)
MFGR	- (s.S. 82)
PT-Zustand	- Peierls-Thouless-Zustand (s.S. 20)
PY-Zustand	- Peierls-Yoccoz-Zustand (s.S. 20)
RGM	- "resonating group method"
SCAL	- (s.S. 78)
SGl	- Schrödingergleichung
SIM	- (s.S. 79)

VB1	- (s.S. 46)
VB2	- (s.S. 46)
VB3	- (s.S. 46)
VM1	- (s.S. 50)
VM2	- (s.S. 50)
VM3	- (s.S. 50)
VS1	- (s.S. 40)
VS2	- (s.S. 40)
VS3	- (s.S. 40)
WF	- Wellenfunktion
$\mathcal{L}_1$	- Raum der absolut integrierbaren Funktionen
$\mathcal{L}_2$	- Raum der quadratintegrablen Funktionen

7.2 Referenzen

- [AS 72] Handbook of Mathematical Functions, M. Abramowitz, I.A. Stegun eds, New York 1972
- [Ba 74] H. Bauer, Wahrscheinlichkeitstheorie und Grundzüge der Maßtheorie, Berlin 1974
- [Ba 77] C.T.H. Baker, The Numerical Treatment of Integral Equations, Oxford 1977
- [BB 75] R. Beck, J. Borysowicz, D.M. Brink, M.V. Mihailovic, Nucl. Phys. A 244 (1975) 45, 58
- [BLH 74] D. Baye, P.H. Heenen, M. Libert-Heinemann, Nucl. Phys. A 233 (1974) 304
P.H. Heenen, Nucl. Phys. A 272 (1976) 399
- [BHL 77] D. Baye, P.H. Heenen, M. Libert-Heinemann, Nucl. Phys. A 291 (1977) 230
D. Baye, P.H. Heenen, M. Libert-Heinemann, Nucl. Phys. A 308 (1978) 229
M. Libert-Heinemann, D. Baye, P.H. Heenen, Nucl. Phys. A 339 (1980) 429
D. Baye, M. Hanck, J. Phys. G 7 (1981) 1073
- [BHL 78] D. Baye, P.H. Heenen, M. Libert-Heinemann, Nucl. Phys. A 308 (1978) 229
- [BL 75] Proc. of the 2nd Int. Seminar on the Generator Coordinate Method for Nuclear Bound States and Reactions, M. Bouten, P. van Leuven eds, Mol 1975
- [BS 79] D. Baye, Y. Salmon, Nucl. Phys. A 323 (1979) 521
- [Ch 74] M.S. Child, Molecular Collision Theory, London, New York 1974
- [CB 77] L.F. Canto, D.M. Brink, Nucl. Phys. A 279 (1977) 85
L.F. Canto, Nucl. Phys. A 279 (1977) 97
- [CDT 78] P. Chattopadhyay, R.M. Dreizler, M. Trsic, M. Fink, Z. Phys. A 285 (1978) 7
- [CDT 81] P. Chattopadhyay, R.M. Dreizler, M. Trsic, J. Phys. B 14 (1981) 3849
- [De 63] Y.N. Demkov, Variational Principles in the Theory of Collisions, Oxford, New York, London 1963
- [DNS 81] K. Degouchi, K. Nishikawa, A. Sado, S. Aono, J. Phys. B 14 (1981) 3305
- [Fi 78] M. Fink, Diplomarbeit, Frankfurt 1978
- [Fr 81] H. Friedrich, Phys. Rep. 74 (1981) 209

- [FHW 74] H. Friedrich, H. Hüsken, A. Weiguny, Nucl. Phys. A 220 (1974) 125
- [FIZ 72] Generator Coordinate Method for Nuclear Bound States and Reactions, Fizika 5 (1972) Suppl.
- [FIZ 77] Proc. of the Int. Symp. on Nuclear Collisions and their Microsc. Description, Fizika 9 (1977) Suppl.
- [FM 71] G.E. Forsythe, C.B. Moler, Computer-Verfahren für lineare algebraische Systeme, München 1971
- [FW 76] H.R. Fiebig, A. Weiguny, Z. Physik A 279 (1976) 275
- [Gi 77] B.G. Giraud, Fizika 9 (1977) Suppl. 3, 345
- [Gl 75] I. Gladwell, Numerical Linear Algebra, in Numerical Solution of Integral Equations, L.M. Davies, J. Walsh eds., Oxford 1975
- [Gr 75] S. Großmann, Funktionalanalysis I, II, Wiesbaden 1975
- [GH 81] B.G. Giraud, Y. Hahn, Phys. Rev. C 23 (1981) 1486
- [GL 78] B.G. Giraud, J. Le Tourneux, Nucl. Phys. A 299 (1978) 342
- [GLO 75] B. Giraud, J. Le Tourneux, E. Osnes, Ann. Phys. (N.Y.) 89 (1975) 359
- [GR 80] K. Goeke, P.G. Reinhardt, Ann. Phys. (N.Y.) 124 (1980) 249
- [GW 57] J.J. Griffin, J.A. Wheeler, Phys. Rev. 108 (1957) 311
- [Hi 76] J.W. Hilgers, SIAM J. numer. Anal. 13 (1976) 172
- [Hu 57] L. Hulthén, The Two-Nucleon Problem, in Handbuch der Physik XXXIX, S. Flügge ed., Berlin 1957
- [HG 81] Y. Hahn, B. Giraud, Phys. Rev. C 23 (1981) 1495
- [HS 72] A.R. Holt, B. Santoso, J. Phys. B 5 (1972) 497, J. Phys. B 6 (1973) 2010
- [HW 53] D.L. Hill, J.A. Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102
- [HWW 77] H. Hüsken, W. Wedekind, A. Weiguny, Nucl. Phys. A 286 (1977) 163
- [IGL] C.T.H. Baker, L. Fox, D.F. Mayers, K. Wright, Comput. J. 7 (1964) 141
J.W. Lee, P.M. Prenter, Numer. Math. 30 (1978) 1

- J.G. Mc Whirter, E.R. Pike, J. Phys. A 11 (1978) 1729
 I.P. Nedelkov, Comp. Phys. Comm. 4 (1972) 157
 J. Replogle, B.D. Holcomb, W.R. Burrus, J. Math. Anal. Appl. 20 (1967) 310
 F.W. Stallmann, Numer. Math. 15 (1970) 297
 V.F. Turchin, V.P. Kozlov, M.S. Malkevich, Sov. Phys. Uspekhi 13 (1971) 681
- [Jo 79] C.J. Joachain, Quantum Collision Theory, Amsterdam 1979
- [Jö 70] K. Jörgens, Lineare Integraloperatoren, Stuttgart 1970
- [Ka 78] M. Kamimura, Prog. Theor. Phys. 62 (1978) Suppl. 236
- [KF 75] A.N. Kolmogorov, S.V. Fomin, Reelle Funktionen und Funktionalanalysis, Berlin 1975
- [La 67] M.M. Lavrantiev, Some Improperly Posed Problems of Mathematical Physics, Berlin, Heidelberg, New York 1967
- [La 74] L. Lathouwers, Nucl. Phys. A 228 (1974) 125
- [La 75] L. Lathouwers, Fredholm Theory for Generator Coordinate Integral Equations, in Proc. of the 2nd int. Seminar on GCM for nuclear bound States and Reactions, M. Bouten, P. van Leuven eds., Mol 1975
- [La 76] L. Lathouwers, Ann. Phys. (N.Y.) 10 (1976) 347
- [La 78] L. Lathouwers, Phys. Rev. A 18 (1978) 2150
- [La 79] L. Lathouwers, J. Phys. B 12 (1979) L99
- [LBH 80] M. Libert-Heinemann, D. Baye, P. H. Heenen, Nucl. Phys. A 339 (1980) 429
- [LL 77] L. Lathouwers, R.L. Lozes, J. Phys. A 10 (1977) 1465
- [LL 79] L. Lathouwers, P. van Leuven, Chem. Phys. Letters 67 (1979) 436
- [LLB 77] L. Lathouwers, P. van Leuven, M. Bouten, Chem. Phys. Letters 52 (1977) 439
- [Mi 75] G.F. Miller, Fredholm Equations of the First Kind, in Numerical Solution of Integral Equations, L.M. Delves, J. Walsh eds, Oxford 1975
- [MK 76] Y. Mito, M. Kamimura, Prog. Theor. Phys. 56 (1976) 583
- [MP 78] M.V. Mihailovic, M. Poljsak, Nucl. Phys. A 311 (1978) 377
- [Na 75] I.P. Natanson, Theorie der Funktionen einer reellen Veränderlichen, Berlin 1975

- [Ne 66] R.G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, New York 1966
- [Ph 62] D. Phillips, *J. Ass. Comput. Mach.* 9 (1962) 84
- [PP 75] G. Paiano, D. Picca, *J. comput. Appl. Math.* 1 (1975) 93
- [PT 62] R.E. Peierls, D.J. Thouless, *Nucl. Phys.* 38 (1962) 154
- [PTP 80] E.J.V. de Passos, A.F.R. de Toledo-Piza, *Phys. Rev. C* 21 (1980) 425
- [PY 57] R.E. Peierls, J. Yoccoz, *Proc. Phys. Soc. A* 10 (1957) 381
- [Ri 78] R.D. Richtmyer, *Principles of Advanced Mathematical Physics*, Vol. I, New York, Heidelberg, Berlin 1978
- [Ru 66] W. Rudin, *Real and Complex Analysis*, New York 1966
- [RS 80] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-Body-Problem*, Chap. 10, New York, Heidelberg, Berlin 1980
- [Si 71] A.G. Sitenko, *Lectures in Scattering Theory*, Oxford 1971
- [Sm 58] F. Smithies, *Integral Equations*, Cambridge University Press 1958
- [Sw 60] P. Swan, *Nucl. Phys.* 18 (1960) 245; 21 (1960) 233
- [SJ 66] Don Secrest, B.R. Johnson, *J. Chem. Phys.* 45 (1966) 4556
- [Ta 65] K. Takayanagi, *Adv. Atom. Molec. Phys.* I, (1965) 149; *Prog. Theor. Phys.* 25 (1963) Suppl.
- [Ta 72] N. de Takacsy, *Phys. Rev. C* 5 (1972) 1883
- [Th 81] A.J. Thakkar, *J. chem. Phys.* 75 (1981) 4496
- [Ti 63] A.N. Tihonov, *Soviet Math.* 4 (1963) 1035, 1624
A.N. Tihonov, V.B. Glasko, *J. Comp. Math. and Math. Phys.* 4 (1964) 236
A.B. Bakushinskii, V.N. Straklov, *USSR comput. Math. Math. Phys.* 8 (1968) 250
J.W. Hilgers, *MRC tech. Summ. Rep.* 1472 (1974)
- [To 72] I.M. Torrens, *Interatomic Potentials*, New York, London 1972
- [TP 78] A.F.R. de Toledo-Piza, E.J.V. de Passos, *Nuovo Cim.* 45 B (1978) 1

[TPG 77]

A.F.R.de Toledo-Piza, E.J.V. de Passos,
D. Galletti, M.C. Nemes, M.M. Watanabe, Phys.
Rev. C 15 (1977) 1477

[Wo 63]

L. Wojtczak, Nucl. Phys. 48 (1963) 325

[Wo 70]

C.W. Wong, Nucl. Phys. A 147 (1970) 545

[Wo 73]

C.W. Wong, Nucl. Phys. A 202 (1973) 209

[Wo 75]

C.W. Wong, Phys. Rep. 15 C (1975) 283

[ZKK 75]

P.P. Zabreyko, A.I. Koshelev, M.A. Krasnosel'-
skii, S.G. Mikhlin, L.S. Rakovshchik, V.Ya.
Stet'senko, Integral Equations-a Reference Text,
Leyden 1975

An dieser Stelle möchte ich Herrn Professor Dr. R. M. Dreizler, der diese Arbeit angeregt hat, für seine intensive Betreuung und hilfreiche Unterstützung sehr herzlich danken.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. H. J. Lüdde für seine Diskussionsbereitschaft und seine hilfreichen Ratschläge. Ferner danke ich Frau Dipl. Phys. M. Fink und den Herren Dr. P. Chattopadhyay und Dr. E. Groß für viele anregende Diskussionen. Frau D. Somieski danke ich für die sorgfältige Anfertigung der maschinengeschriebenen Fassung dieser Arbeit.

Weiterhin bedanke ich mich bei der FAZIT-Stiftung für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

Die numerischen Rechnungen wurden an den Rechenanlagen der Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt durchgeführt.

Lebenslauf

Geburt: 28.4.1951 in Winden, Kreis Düren;

Schulen: von Ostern 1957 bis Ostern 1961 Kath.
Volksschule Winden;
von Ostern 1961 bis Sommer 1969 Stiftisches
Gymnasium Düren, altsprachlicher Zweig;
Schulabschluß: Abitur;

Studium: vom Wintersemester 1969 bis Sommersemester
1971 Chemiestudium an der RWTH Aachen;
Vordiplom in Chemie im Sommersemester 1971;
vom Wintersemester 1971 bis Wintersemester
1977 Chemiestudium an der J. W. Goethe-
Universität Frankfurt;
Diplom in Chemie im Wintersemester 1977;
Beginn der Doktorarbeit im Sommersemester
1977.

Meine akademischen Lehrer waren die Professoren

U. Franck, Fucks, Kosfeld, Paetzold, Sartori, Schönert,
Stetter in Aachen und F. Becker, Bock, Constantinescu,
Dreizler, Greiner, H. Hartmann, Hensen, Kessler, Kohlmaier,
Mauck, Merzbacher, Miller, Neumann, Quinkert, Rehm, Stummel,
tom Dieck in Frankfurt.

